

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2021년 1월 21일 (21.01.2021) WIPO | PCT



(10) 국제공개번호
WO 2021/010770 A1

- (51) 국제특허분류:
C07F 5/02 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/56 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2020/009383
- (22) 국제출원일: 2020년 7월 16일 (16.07.2020)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2019-0086567 2019년 7월 17일 (17.07.2019) KR
- (71) 출원인: 에스에프씨 주식회사 (SFC CO., LTD.) [KR/
KR]; 28122 충청북도 청주시 청원구 오창읍 과학산업5
로 89, Chungcheongbuk-do (KR).
- (72) 발명자: 심소영 (SHIM, So Young); 28122 충청북도
청주시 청원구 오창읍 과학산업5로 89, Chungcheong-
buk-do (KR). 유세진 (YU, Se Jin); 28122 충청북도 청주
시 청원구 오창읍 과학산업5로 89, Chungcheongbuk-do
(KR).
- (74) 대리인: 특허법인 공간 (GHONG-GAN INTER-
NATIONAL PATENT LAW FIRM); 06224 서울시 강
남구 논현로 412, 402호, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국
내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT,

AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,
CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC,
EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU,
ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW,
KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK,
MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA,
PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD,
SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ,
UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역
내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE,
LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM,
ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유
럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI,
FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK,
MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI
(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML,
MR, NE, SN, TD, TG).

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(54) Title: NOVEL BORON COMPOUND AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE COMPRISING SAME

(54) 발명의 명칭: 신규한 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자

80
70
60
50
40
30
20
10

(57) Abstract: The present invention relates to a boron compound usable in an organic light-emitting device, and an organic light-emitting device comprising same, and more specifically, to a boron compound represented by any one of chemical formula A to chemical formula D, and an organic light-emitting device comprising same, wherein chemical formula A to chemical formula D are the same as those described in the detailed description of the invention.

(57) 요약서: 본 발명은 유기발광소자에 사용가능한 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자에 관한 것으로, 보다 자세하게는 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중에서 어느 하나로 표시되는 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자에 관한 것으로서, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]는 발명의 상세한 설명에 기재된 바와 동일하다.

WO 2021/010770 A1

명세서

발명의 명칭: 신규한 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자 기술분야

- [1] 본 발명은 유기 발광 소자에 사용될 수 있는 신규한 보론 화합물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는, 유기 발광 소자내 발광층의 도판트 재료로 사용될 수 있으며, 이를 통해 높은 발광 효율 및 장수명 등의 소자 특성을 구현할 수 있는 신규한 보론 화합물 및 상기 보론 화합물을 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 자기 발광 현상을 이용한 디스플레이로서, 시야각이 크고 액정 디스플레이에 비해 경박, 단소해질 수 있고, 빠른 응답 속도 등의 장점을 가지고 있어 풀-컬러(full-color) 디스플레이 또는 조명으로의 응용이 기대되고 있다.
- [3] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기 발광 소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.
- [4] 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다.
- [5] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우, 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트-도판트 시스템을 사용할 수 있다.

- [6] 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때, 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [7] 이러한 발광층 중 도판트 화합물로서 최근 보른 화합물에 대해 연구가 되고 있으며, 이와 관련된 종래기술로서 한국공개특허공보 제10-2016-0119683호(2016.10.14)에는 붕소 원자와 산소 원자 등으로 복수의 방향족 고리를 연결한 다환 방향족 화합물 및 이를 포함하는 유기발광 소자가 개시되어 있고, 국제특허공개공보 제2017-188111호(2017.11.02)에서는 복수의 축합 방향족 고리가 붕소 원자와 질소에 의해 연결된 구조의 화합물을 발광층내 도판트로서 사용하고, 또한 호스트로서 안트라센 유도체를 이용한 유기발광 소자가 기재되어 있다.
- [8] 그러나, 상기 종래기술을 포함하여 유기발광소자의 발광층에 사용하기 위한 다양한 형태의 화합물이 제조되었음에도 불구하고 아직까지 유기 발광 소자용으로 응용가능하면서, 저전압구동이 가능하면서도 안정하고 고효율 특성을 가지는 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자의 개발의 필요성은 지속적으로 요구되고 있는 실정이다.

발명의 상세한 설명

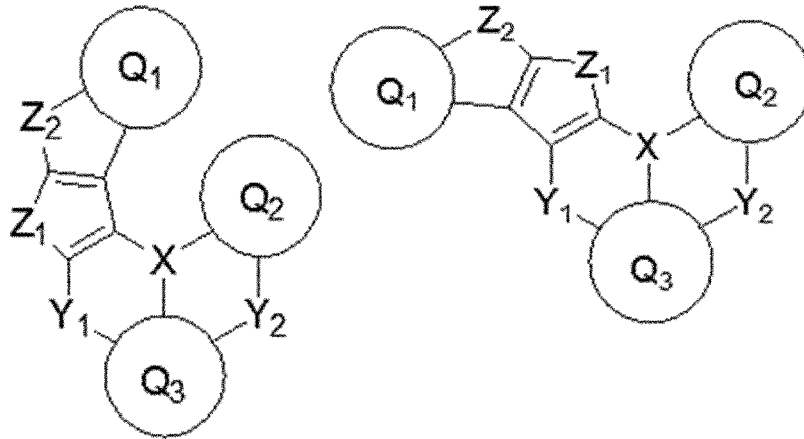
기술적 과제

- [9] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 유기발광소자내 발광층의 도판트 물질로 사용가능한 신규한 구조의 보른 화합물을 제공하는 것이다.
- [10] 또한 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 보른 화합물을 유기 발광 소자내 도판트 물질에 적용함으로써, 높은 발광 효율 및 장수명 등의 소자 특성이 우수한 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)를 제공하는 것이다.

과제 해결 수단

- [11] 본 발명은 상기 기술적 과제들을 달성하기 위하여, 하기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보른 화합물을 제공한다.
- [12] [화학식 A] [화학식 B]

[13]

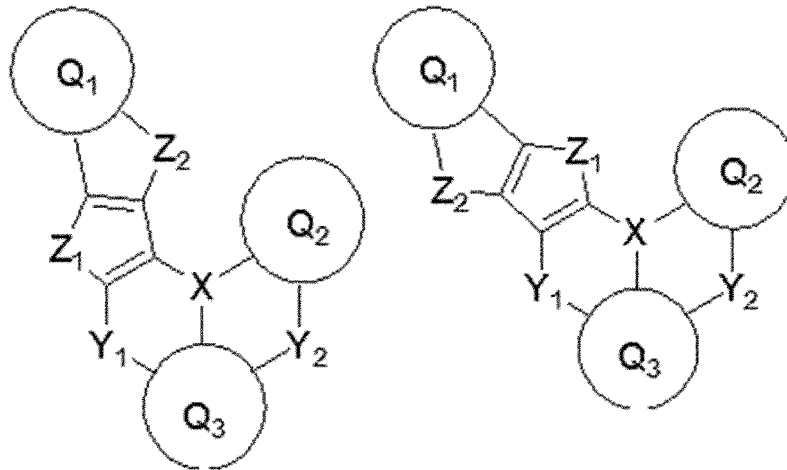


[14]

[15]

[화학식 C] [화학식 D]

[16]



[17]

[18] 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 에서,

[19] 상기 Q_1 내지 Q_3 은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리이고,[20] 상기 X 는 B, P, P=O 중에서 선택되는 어느 하나이고,[21] 상기 Y_1 및 Y_2 는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N- R_1 , CR₂R₃, O, S 및 SiR₄R₅ 중에서 선택되는 어느 하나이며,[22] 상기 Z_1 및 Z_2 는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N- R_6 , CR₇R₈, O, S 및 SiR₉R₁₀ 중에서 선택되는 어느 하나이고,[23] 상기 치환기 R_1 내지 R_{10} 은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는

비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 니트로기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,

- [24] 상기 R_2 및 R_3 , R_4 및 R_5 , R_7 및 R_8 , R_9 및 R_{10} 은 각각 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있으며,
- [25] 상기 Y_1 내 치환기 R_1 내지 R_5 는 상기 Q_3 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [26] 상기 Y_2 내 치환기 R_1 내지 R_5 는 상기 Q_2 고리 또는 Q_3 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [27] 상기 연결기 Z_2 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 상기 Q_1 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [28] 상기 [화학식 A]에서,
- [29] 상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Z_2 또는 Y_1 과 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [30] 상기 [화학식 B]에서,
- [31] 상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Z_2 와 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [32] 상기 [화학식 C]에서,
- [33] 상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Y_1 과 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [34] 상기 [화학식 D]에서,
- [35] 상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Q_1 과 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있다.

발명의 효과

- [36] 본 발명에 따른 신규한 보론 화합물을 유기발광소자내 도판트 물질로 이용하는 경우에, 종래기술에 따른 유기발광소자에 비하여 장수명 특성을 나타내며, 또한 보다 개선된 효율을 나타내는 유기발광소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [37] 도 1은 본 발명의 일 구체예에 따른 유기 발광 소자의 개략도이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [38] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 본 발명의 각 도면에 있어서, 구조물들의 사이즈나 치수는 본 발명의 명확성을 기하기 위하여 실제보다 확대하거나 축소하여 도시한 것이고, 특징적 구성이 드러나도록 공지된 구성들은 생략하여 도시하였으므로 도면으로 한정하지는 아니한다.

- [39] 또한, 도면에서 나타난 각 구성의 크기 및 두께는 설명의 편의를 위해 임의로

나타내었으므로, 본 발명이 반드시 도시된 바에 한정되지 않으며, 또한 도면에서 여러 층 및 영역을 명확하게 표현하기 위하여 두께를 확대하여 나타내었다. 그리고 도면에서, 설명의 편의를 위해, 일부 층 및 영역의 두께를 과장되게 나타내었다. 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 때, 이는 다른 부분 "바로 상에" 있는 경우뿐 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.

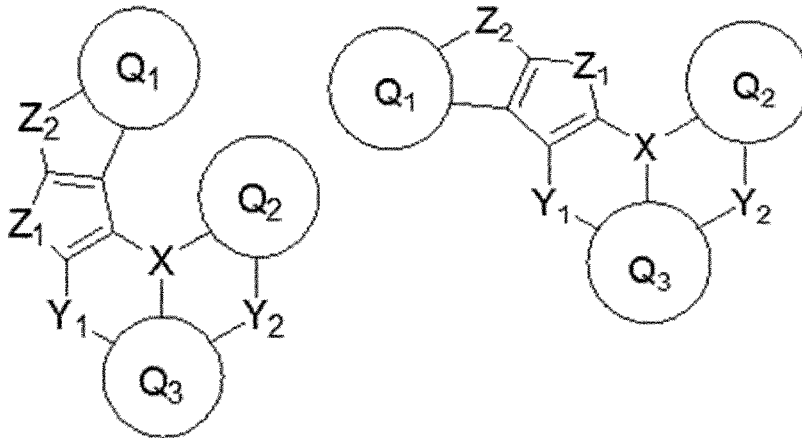
[40] 또한, 명세서 전체에서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다. 또한, 명세서 전체에서, "~상에"라 함은 대상 부분의 위 또는 아래에 위치함을 의미하는 것이며, 반드시 중력 방향을 기준으로 상측에 위치하는 것을 의미하는 것은 아니다.

[41]

[42] 본 발명은 하기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물을 제공한다.

[43] [화학식 A] [화학식 B]

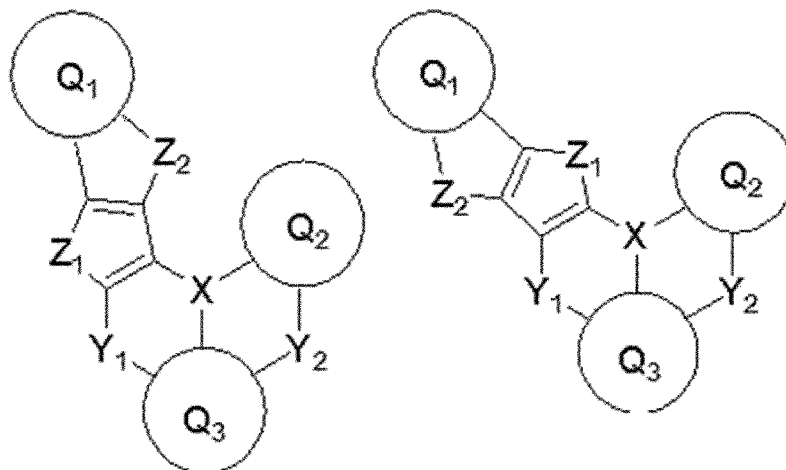
[44]



[45]

[46] [화학식 C] [화학식 D]

[47]



[48]

- [49] 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 에서,
- [50] 상기 Q_1 내지 Q_3 은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리이고,
- [51] 상기 X는 B, P, P=O 중에서 선택되는 어느 하나이고,
- [52] 상기 Y_1 및 Y_2 는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N-R₁, CR₂R₃, O, S 및 SiR₄R₅ 중에서 선택되는 어느 하나이며,
- [53] 상기 Z_1 및 Z_2 는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N-R₆, CR₇R₈, O, S 및 SiR₉R₁₀ 중에서 선택되는 어느 하나이고,
- [54] 상기 치환기 R₁ 내지 R₁₀은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 니트로기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,
- [55] 상기 R₂ 및 R₃, R₄ 및 R₅, R₇ 및 R₈, R₉ 및 R₁₀은 각각 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있으며,
- [56] 상기 Y₁ 내 치환기 R₁ 내지 R₅는 상기 Q₃ 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [57] 상기 Y₂ 내 치환기 R₁ 내지 R₅는 상기 Q₂ 고리 또는 Q₃ 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [58] 상기 연결기 Z₂ 내 치환기 R₆ 내지 R₁₀은 상기 Q₁ 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [59] 상기 [화학식 A]에서,
- [60] 상기 Z₁ 내 치환기 R₆ 내지 R₁₀은 각각 Z₂ 또는 Y₁과 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [61] 상기 [화학식 B]에서,
- [62] 상기 Z₁ 내 치환기 R₆ 내지 R₁₀은 각각 Z₂ 와 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [63] 상기 [화학식 C]에서,
- [64] 상기 Z₁ 내 치환기 R₆ 내지 R₁₀은 각각 Y₁과 서로 연결되어 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [65] 상기 [화학식 D]에서,

- [66] 상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Q_1 과 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,
- [67] 여기서, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 3 내지 24의 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 7 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 7 내지 24의 알킬아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기, 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 탄소수 2 내지 24의 디헤테로아릴아미노기, 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 6 내지 24의 아릴티오닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.
- [68]
- [69] 한편, 본 발명에서의 상기 "치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기", "치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 범위를 고려하여 보면, 상기 탄소수 1 내지 30의 알킬기 및 탄소수 5 내지 50의 아릴기의 탄소수의 범위는 각각 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것으로 보아야 한다.
- [70] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 상기 아릴기가 치환기가 있는 경우 서로 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.
- [71] 상기 아릴기의 구체적인 예로는 페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있고, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 ($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$, R' 과 R'' 은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의

- 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [72] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로 원자를 포함하고, 나머지 고리 원자가 탄소인 탄소수 2 내지 24의 고리 방향족 시스템을 의미하며, 상기 고리들은 융합(fused)되어 고리를 형성할 수 있다. 그리고 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [73] 또한 본 발명에서 상기 방향족 헤테로고리는 방향족 탄화수소 고리에서 방향족 탄소중 하나 이상이 헤테로 원자로 치환된 것을 의미하며, 상기 방향족 헤테로 고리는 바람직하게는 방향족 탄화수소내 방향족 탄소 1 내지 3개가 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.
- [74]
- [75] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기는 알칸(alkane)으로부터 수소 하나가 제거된 치환기로서, 직쇄형, 분지형을 포함하는 구조이며, 이의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [76] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 시클로알킬기, 시클로알콕시기 등에서의 '시클로'는 알킬기 또는 알콕시기내 포화탄화수소의 단일 고리 또는 다중 고리를 형성할 수 있는 구조의 치환기를 의미하며, 예컨대 시클로알킬기의 구체적인 예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 메틸시클로펜틸, 메틸시클로헥실, 에틸시클로펜틸, 에틸시클로헥실, 아다만틸, 디시클로펜타디에닐, 데카히드로나프틸, 노보닐, 보닐, 아이소보닐 등을 들 수 있고, 상기 시클로알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능 하며, 이는 시클로알콕시에서도 마찬가지로 적용될 수 있다.
- [77] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 알콕시기는 알킬기 또는 시클로알킬기의 말단에 산소원자가 결합한 치환기로서, 이의 구체적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소부틸옥시, sec-부틸옥시, 펜틸옥시, iso-아밀옥시, 헥실옥시, 시클로부틸옥시, 시클로펜틸옥시, 아다만탄옥시, 디시클로펜탄옥시, 보닐옥시, 이소보닐옥시 등을 들 수 있고, 상기 알콕시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [78] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴알킬기의 구체적인 예로는 페닐메틸(벤질), 페닐에틸, 페닐프로필, 나프틸메틸 나프틸에틸 등을 들 수 있고, 상기 아릴알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [79] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴,

디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로부틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있고, 상기 실릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능 하다.

[80] 또한, 본 발명에서 알케닐(alkenyl)기는 두 개의 탄소원자에 의해 이루어지는 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 포함하는 알킬 치환기를 의미하며, 또한 알키닐(alkynyl)기는 두 개의 탄소원자에 의해 이루어지는 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함하는 알킬 치환기를 의미한다.

[81] 또한, 본 발명에서 사용되는 알킬렌(alkylene)기는 직쇄형 또는 분지형 형태의 포화탄화수소인 알칸(alkane) 분자내 두 개의 수소 제거에 의하여 유도된 유기 라디칼로, 상기 알킬렌기의 구체적인 예로는 메틸렌기, 에틸렌기, 프로필렌기, 이소프로필렌기, 이소부틸렌기, sec-부틸렌기, tert-부틸렌기, 펜틸렌기, iso-아밀렌기, 헥실렌기 등을 들 수 있고, 상기 알킬렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.

[82] 또한 본 발명에서 디아릴아미노기는 상기 기재된 동일하거나 상이한 두 개의 아릴기가 질소원자에 결합된 아민기를 의미하며, 또한 본 발명에서 디헤테로아릴아미노기는 동일하거나 상이한 두 개의 헤테로아릴기가 질소원자에 결합된 아민기를 의미하고, 또한, 상기 아릴(헤테로아릴)아미노기는 상기 아릴기와 헤테로아릴기가 각각 질소원자에 결합된 아민기를 의미한다.

[83] 한편, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D], [화학식 H] 내 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환' 대한 보다 바람직한 예로서, 이는 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 12의 알킬기, 탄소수 1 내지 12의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 2 내지 12의 알케닐기, 탄소수 2 내지 12의 알키닐기, 탄소수 3 내지 12의 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 12의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 18의 아릴기, 탄소수 7 내지 20의 아릴알킬기, 탄소수 7 내지 20의 알킬아릴기, 탄소수 2 내지 18의 헤테로아릴기, 탄소수 2 내지 18의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 12의 알콕시기, 탄소수 1 내지 12의 알킬아미노기, 탄소수 6 내지 18의 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 18의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 내지 12의 알킬실릴기, 탄소수 6 내지 18의 아릴실릴기, 탄소수 6 내지 18의 아릴옥시기, 탄소수 6 내지 18의 아릴티오닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것일 수 있다.

[84]

[85] 본 발명에 있어서 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리인 Q₂ 및 Q₃ 고리가 중심 원자(X)에 각각 연결되는 구조적 특징을 가지며, Q₂ 및 Q₃ 고리는 연결기 Y₂ 의해 서로 연결되고, Q₃ 고리는 연결기 Y₁에 의해 연결되며, 상기 Z₁ 및 두개의 이중결합(디엔)을 포함하는 오각고리의 일측에 위치하는 인접한 두 개의 탄소 원자가 각각 상기 Y₁ 및 X에 각각 연결되고, 또한 상기 Z₁ 및 두개의

이중결합(디엔)을 포함하는 오각고리의 타측에 위치하는 인접한 두 개의 탄소 원자가 각각 Z_2 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리인 Q_1 에 각각 연결됨으로써, 상기 Z_1 을 포함하는 5각고리와, Z_2 을 포함하는 5각고리와, X 및 Y_1 을 포함하는 6각고리가 축합고리를 형성하는 구조적 특징을 가진다.

[86]

[87] 한편, 본 발명에서, 상기 R_2 및 R_3 , R_4 및 R_5 , R_7 및 R_8 , R_9 및 R_{10} 은 각각 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있으며'의 경우에 이는 상기 R_2 및 R_3 각각으로부터 하나의 수소라디칼을 제거하고 이들을 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성할 수 있는 것을 의미하며, 또한 R_4 및 R_5 각각으로부터 하나의 수소라디칼을 이들을 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성할 수 있는 것을 의미하며, 나머지 치환기들에 있어서도 마찬가지로 적용될 수 있다.

[88]

또한, 상기 Y_1 내 치환기 R_1 내지 R_5 는 상기 Q_3 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,'의 경우도 이는 Q_3 고리 내 하나의 수소라디칼을 제거하며, 상기 R_1 에서 하나의 수소라디칼을 제거하여 이들을 서로 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성할 수 있는 것을 의미하거나, 또는 Q_3 고리 내 하나의 수소라디칼을 제거하며, 상기 R_2 또는 R_3 에서 하나의 수소라디칼을 제거하여 이들을 서로 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성할 수 있는 것을 의미하거나, 또는 Q_3 고리 내 하나의 수소라디칼을 제거하며, 상기 R_4 또는 R_5 에서 하나의 수소라디칼을 제거하여 이들을 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성할 수 있는 것을 의미하며, 이는 이후에 기술될 본 발명의 명세서 및 청구범위내 '~와 결합하여 추가적으로 고리를 형성'하는 경우에, 고리를 형성하기 위한 2개의 치환기로부터 각각 하나의 수소라디칼을 제거하고 이들을 서로 연결하여 고리를 형성할 수 있음을 의미한다.

[89]

본 발명에 따른 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 상기 Q_1 내지 Q_3 은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리일 수 있고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 방향족 헤테로고리일 수 있고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 14의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 14의 방향족 헤테로고리일 수 있다.

[90]

일 실시예로서, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 Q_3 고리에 연결된 연결기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 N- R_1 일 수 있고, 이 경우에 상기 R_1 은 앞서 정의된 바와 동일하다.

[91]

또한, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 중 적어도

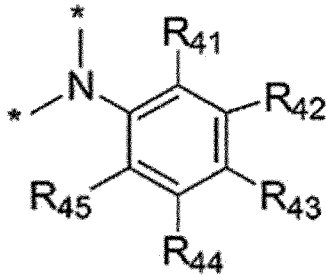
하나는 N-R₁ 인 경우에, 바람직하게는, 상기 치환기 R₁은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기일 수 있으며, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기일 수 있다.

[92] 또한, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y₁ 및 Y₂가 각각 N-R₁인 경우에, 바람직하게는, 상기 치환기 R₁은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기일 수 있다.

[93] 또한, [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 상기 연결기 Y₁ 및 Y₂ 중에서 적어도 하나는 서로 동일하거나, 상이하더라도 하기 [구조식 A]로 표시되는 연결기일 수 있다.

[94] [구조식 A]

[95]



[96] 상기 [구조식 A]에서 "-*"은 상기 치환기 Z₁에 연결된 탄소원자, 또는 Z₁을 포함하는 오각고리내 Y₁에 연결된 탄소원자, Q₂ 고리에서의 방향족 탄소원자, 또는 Q₃ 고리에서의 방향족 탄소원자와 각각 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

[97] 상기 [구조식 A]에서 상기 R₄₁ 내지 R₄₅는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 니트로기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나 선택되는 어느 하나이며, 상기 R₄₁ 및 R₄₅는 각각 상기 Q₂ 고리 또는 Q₃ 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있다.

[98] 한편, 본 발명에서 상기 R₄₁ 및 R₄₅는 상기 Q₂ 고리 또는 Q₃ 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성하게 되는 경우에, 이는 앞서의 R₂ 및 R₃, R₄ 및 R₅ 등은 각각 서로 연결되는 경우 등에서

살펴본 바와 마찬가지로, 상기 치환기 R_{41} 또는 R_{45} 내의 하나의 수소라디칼을 제거하며, 또한, Q_2 고리 또는 Q_3 고리내 하나의 수소라디칼을 제거하고 이들을 연결함으로써 추가적으로 고리를 형성하는 것을 의미하며, 이는 명세서내 이후에 기술될 '추가적으로 고리를 형성'하는 경우에 동일하게 적용될 수 있다.

[99] 일 실시예로서, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 Q_3 고리에 연결된 연결기 Y_1 및 Y_2 는 각각 동일하거나 상이하며, $N-R_1$ 일 수 있고, 이 경우에 상기 R_1 은 앞서 정의된 바와 동일하다.

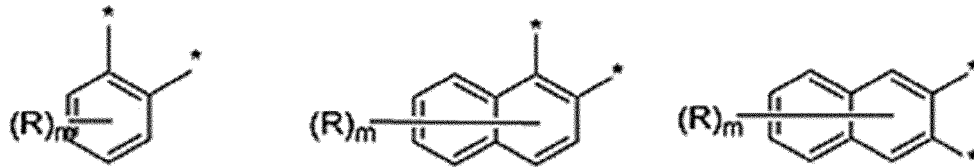
[100] 또한, 본 발명의 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 중에서 적어도 하나는 산소(O) 원자일 수 있고, 또한, 본 발명의 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 중심 원자(X)는 붕소(B) 원자일 수 있다.

[101]

[102] 한편, 본 발명에 따른 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]로 표시되는 화합물내 Q_1 내지 Q_3 의 방향족 탄화수소 고리는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리일 수 있고, 이 경우에, 바람직하게는 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 Q_1 및 Q_2 의 방향족 탄화수소 고리는 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 하기 [구조식 10] 내지 [구조식 21] 중에서 선택되는 어느 하나 일 수 있다.

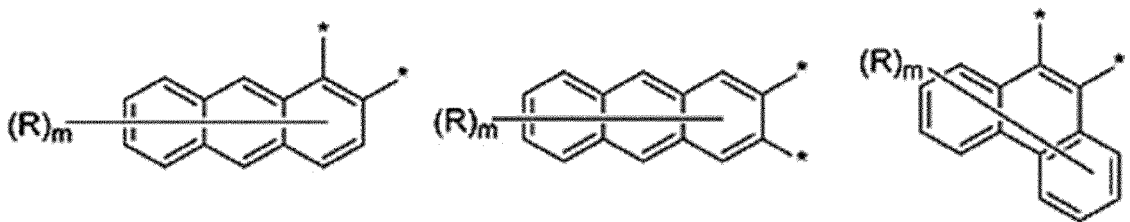
[103] [구조식 10] [구조식 11] [구조식 12]

[104]



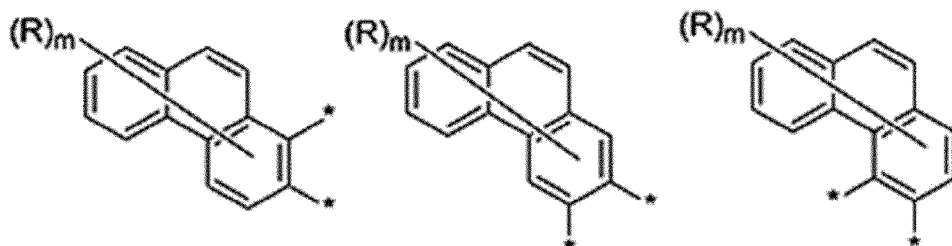
[105] [구조식 13] [구조식 14] [구조식 15]

[106]



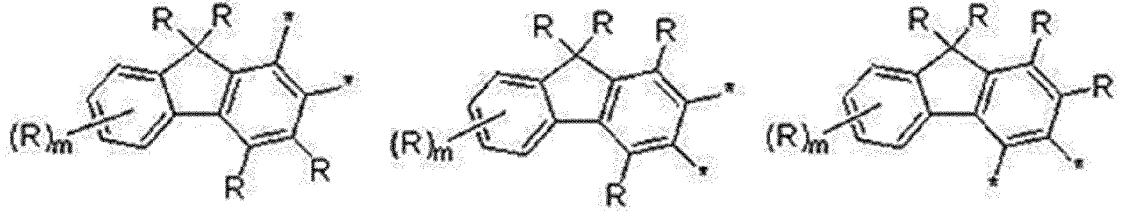
[107] [구조식 16] [구조식 17] [구조식 18]

[108]



[109] [구조식 19] [구조식 20] [구조식 21]

[110]



[111] 상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21] "-*"는 상기 Q₁ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 치환기 Z₂ 또는 치환기 Z₂를 포함하는 오각고리내 탄소원자와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하거나, 또는 상기 Q₂ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 X 또는 연결기 Y₂와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며, .

[112] 상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 상기 R은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 2 내지 24의 디헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,

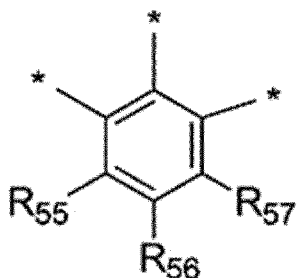
[113] 상기 m은 1 내지 8의 정수이며, m이 2이상인 경우 또는 R이 2이상인 경우에는 각각의 R은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[114]

[115] 또한, 상기 Q₁ 내지 Q₃ 고리가 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리인 경우에, [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 Q₃의 방향족 탄화수소 고리는 하기 [구조식 B]로 표시되는 고리일 수 있다.

[116] [구조식 B]

[117]



[118] 상기 [구조식 B]에서 "-*"는 Q₃ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 연결기 Y₁, X 및 연결기 Y₂와 각각 결합하기 위한 결합 사이트를 의미한다.

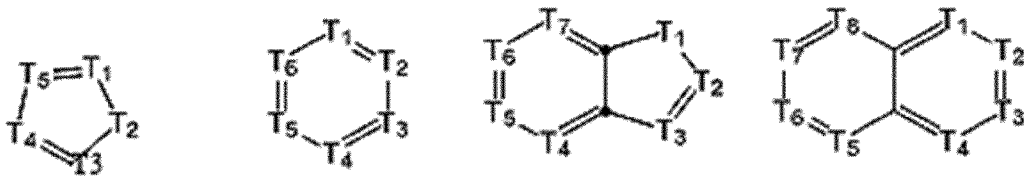
[119] 상기 [구조식 B]에서 상기 R_{55} 내지 R_{57} 은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 2 내지 24의 디헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,

[120] 상기 R_{55} 내지 R_{57} 는 각각 서로 이웃한 치환기와 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있다.

[121] 또한, 본 발명에 따른 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]로 표시되는 화합물내 Q_1 내지 Q_3 고리가 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리인 경우에 이들은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 [구조식 31] 내지 [구조식 40] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

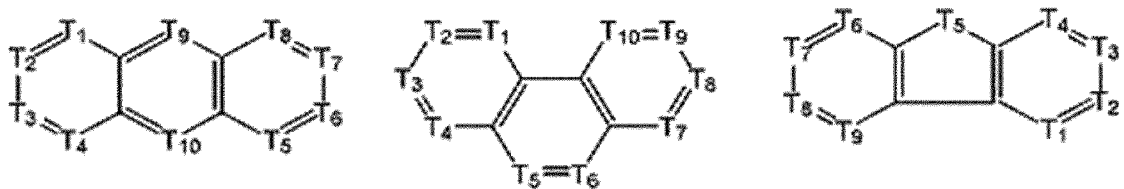
[122] [구조식 31] [구조식 32] [구조식 33] [구조식 34]

[123]



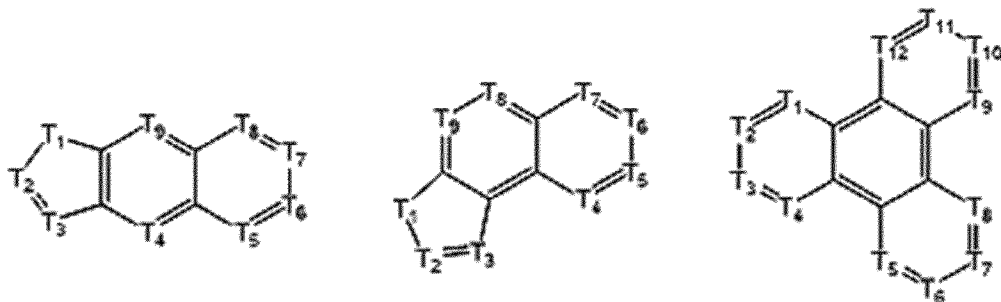
[124] [구조식 35] [구조식 36] [구조식 37]

[125]



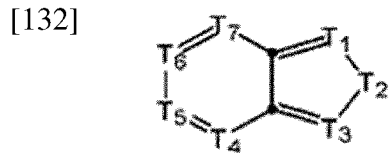
[126] [구조식 38] [구조식 39] [구조식 40]

[127]



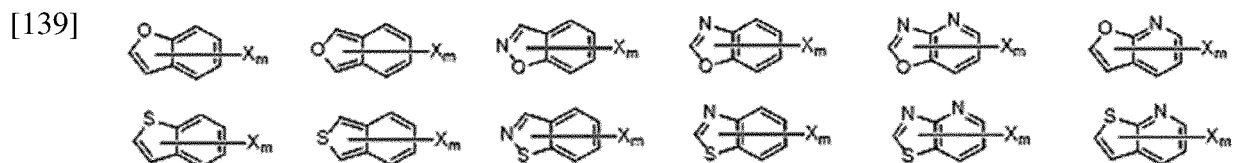
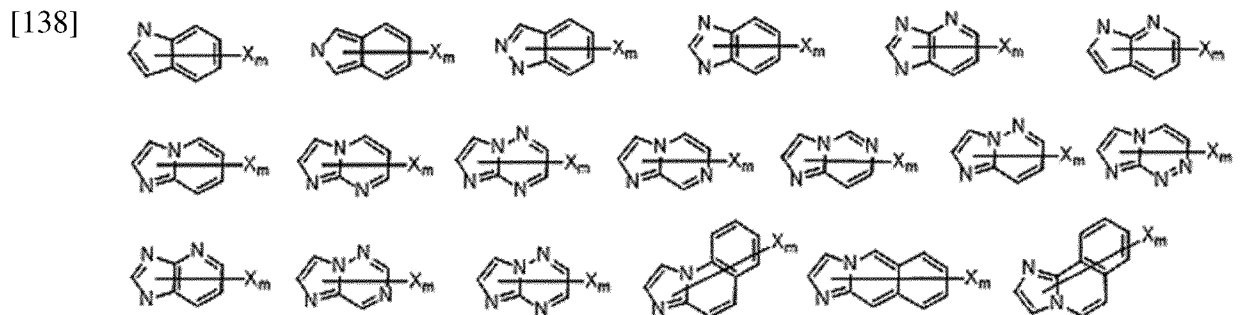
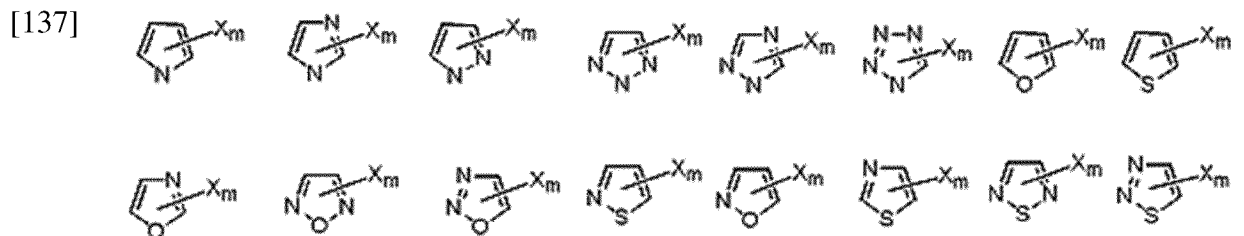
- [128] 상기 [구조식 31] 내지 [구조식 40]에서,
 [129] 상기 연결기 T_1 내지 T_{12} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, $C(R_{61})$, $C(R_{62})(R_{63})$, N , $N(R_{64})$, O , S , Se , Te , $Si(R_{65})(R_{66})$ 및 $Ge(R_{67})(R_{68})$ 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, 상기 연결기 T_1 내지 T_{12} 가 동시에 모두 탄소 원자인 경우는 제외하며, 상기 R_{61} 내지 R_{68} 은 앞서 정의한 R_1 과 동일하다.
 [130] 또한, 상기 [구조식 33]은 전자의 이동에 따른 공명구조에 의한 하기 [구조식 33-1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[131] [구조식 33-1]



- [133] 상기 [구조식 33-1]에서,
 [134] 상기 연결기 T_1 내지 T_7 은 상기 [구조식 31] 내지 [구조식 40]에서 정의한 바와 동일하다.
 [135] 또한, 상기 [구조식 31] 내지 [구조식 40]은 보다 바람직하게는 하기 [구조식 50] 내 헤테로고리 중에서 선택되는 어느 하나의 헤테로고리 구조일 수 있다.

[136] [구조식 50]



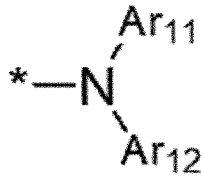
아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기 중에서 선택되는 아민기가 치환될 수 있고, 바람직하게는 상기 Q1 내지 Q3 고리 중 하나 또는 두 개는 치환 또는 비치환된 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 디헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기 중에서 선택되는 아민기가 치환될 수 있으며, 여기서 상기 '치환 또는 비치환'에서의 '치환'은 앞서 정의한 바와 동일하다.

[148]

[149] 또한, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 상기 Q1 내지 Q3 중 적어도 하나는 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리내에 하기 구조식 F로 표시되는 아릴 아미노기가 결합될 수 있으며, 바람직하게는 0 내지 4개의 구조식 F로 표시되는 아릴아미노기가 결합될 수 있고, 더욱 바람직하게는 상기 Q1 내지 Q3 내에 0개 또는 1개 또는 2개의 구조식 F로 표시되는 아릴아미노기가 결합될 수 있다.

[150] [구조식 F]

[151]



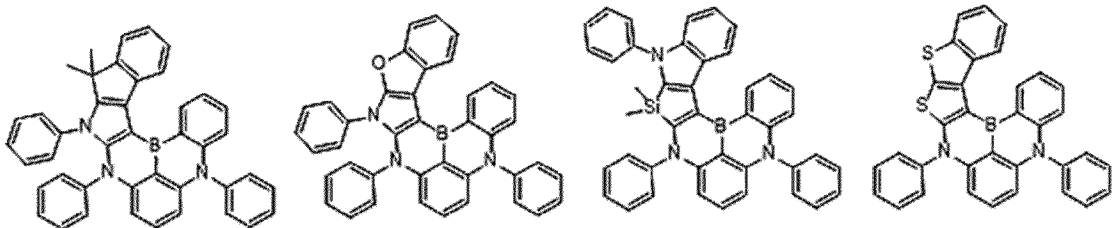
[152] 상기 [구조식 F]에서, "-*"은 Q1 내지 Q3 중 어느 하나 이상의 고리의 방향족 탄소와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

[153] 상기 Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 18의 아릴기 이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴기이고, 이들은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[154]

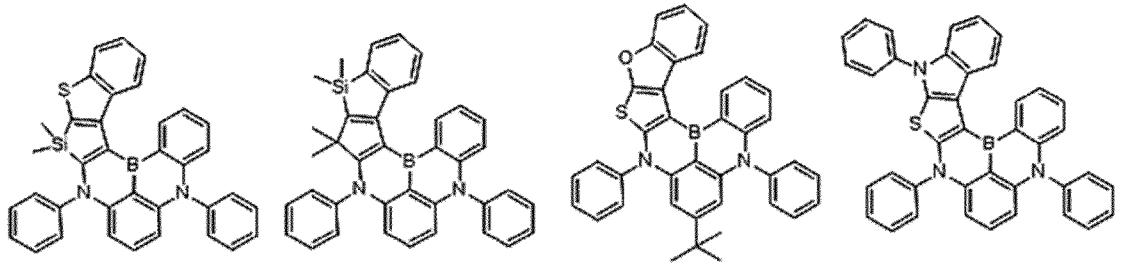
[155] 또한 본 발명에 따른 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물은 <화학식 1> 내지 <화학식 112> 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[156]



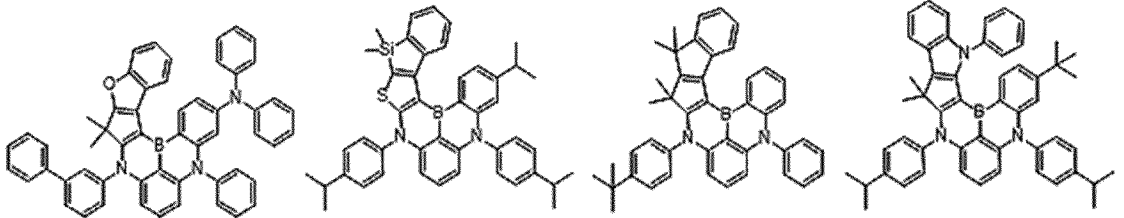
[157] [화학식 1] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4]

[158]



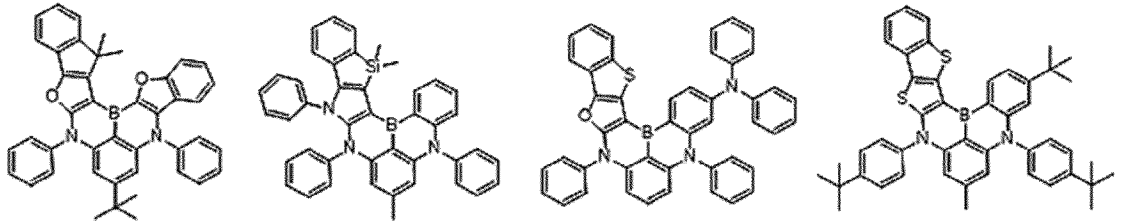
[159] [화학식5] [화학식6] [화학식7] [화학식8]

[160]



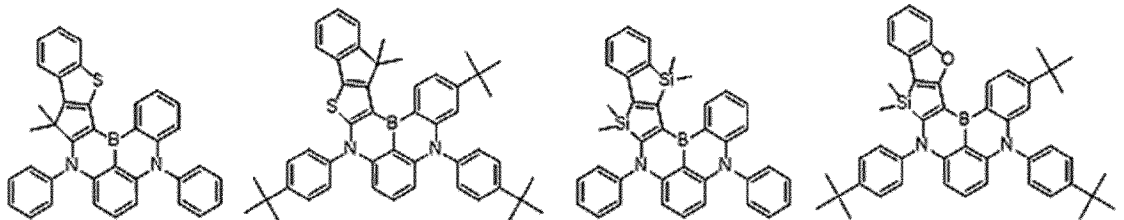
[161] [화학식9] [화학식10] [화학식11] [화학식12]

[162]



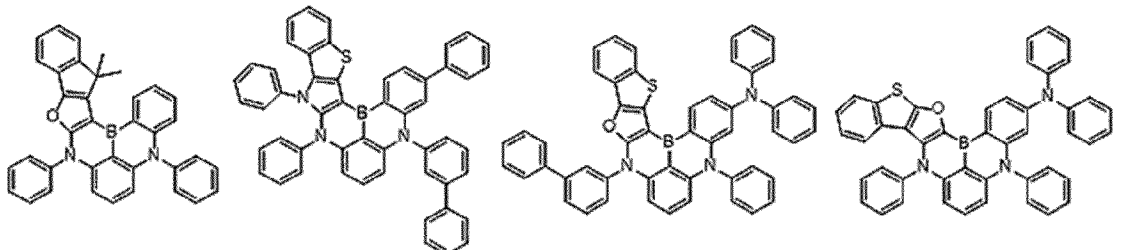
[163] [화학식13] [화학식14] [화학식15] [화학식16]

[164]



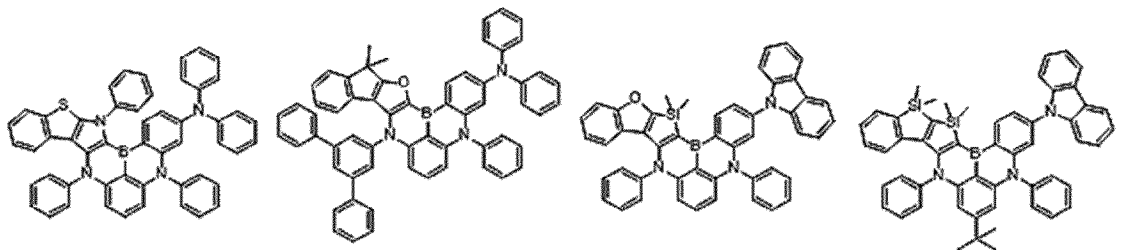
[165] [화학식17] [화학식18] [화학식19] [화학식20]

[166]



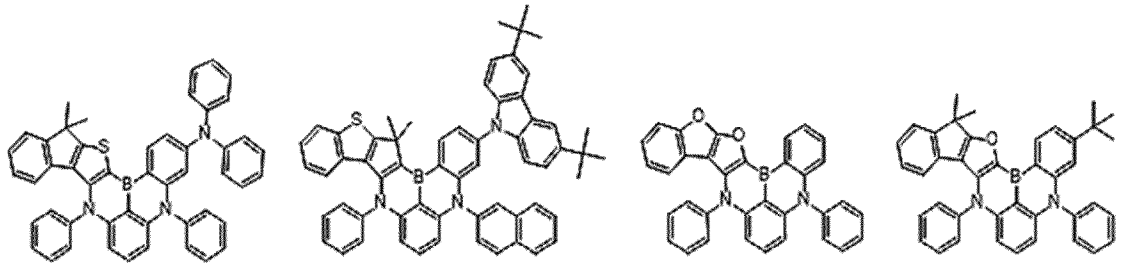
[167] [화학식21] [화학식22] [화학식23] [화학식24]

[168]



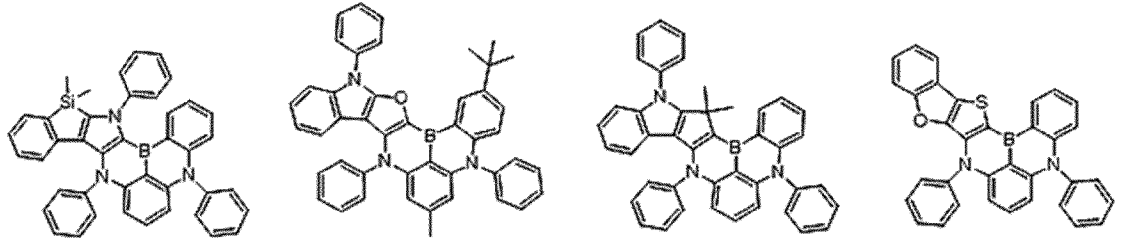
[169] [화학식25] [화학식26] [화학식27] [화학식28]

[170]



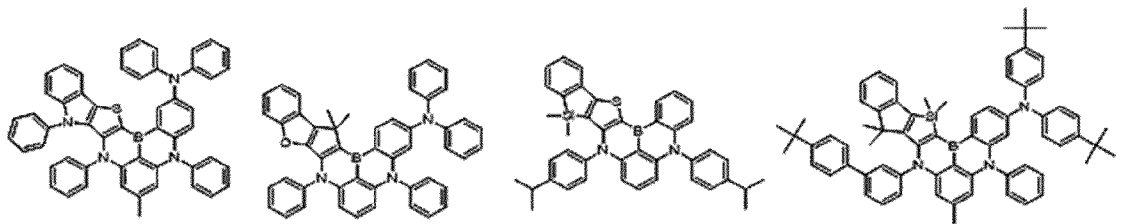
[171] [화학식29] [화학식30] [화학식31] [화학식32]

[172]



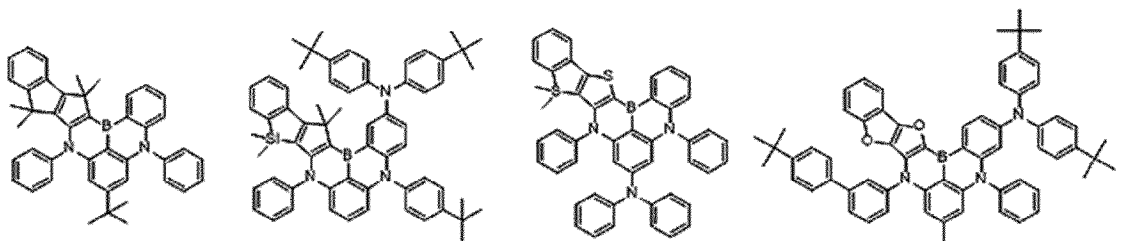
[173] [화학식33] [화학식34] [화학식35] [화학식36]

[174]



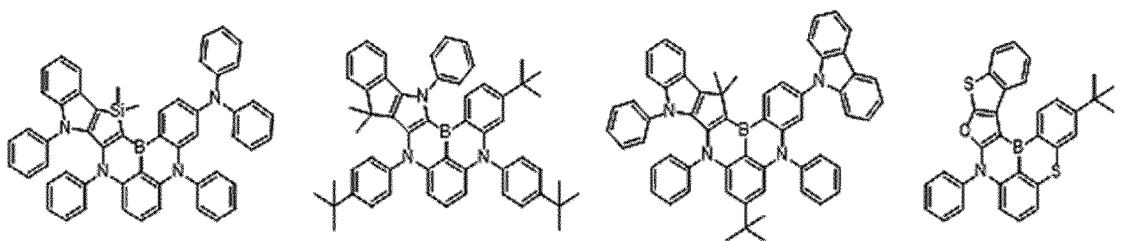
[175] [화학식37] [화학식38] [화학식39] [화학식40]

[176]



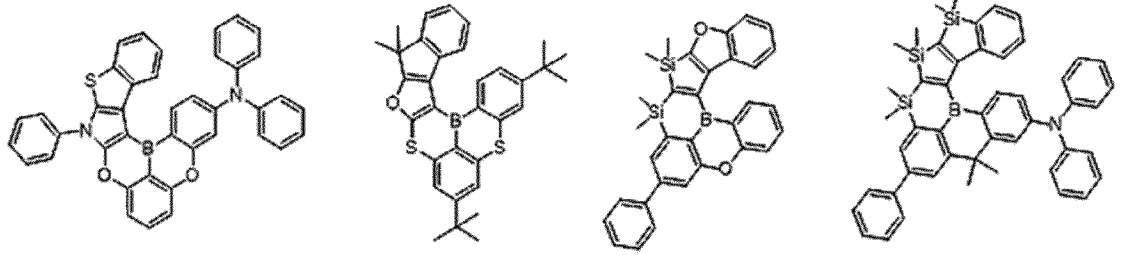
[177] [화학식41] [화학식42] [화학식43] [화학식44]

[178]



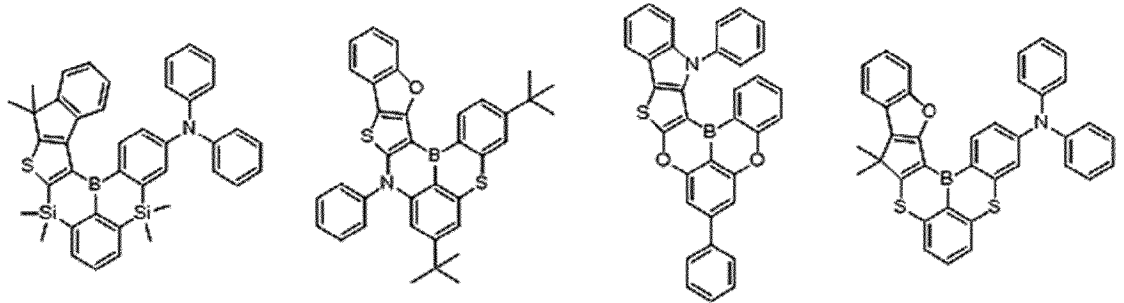
[179] [화학식45] [화학식46] [화학식47] [화학식48]

[180]



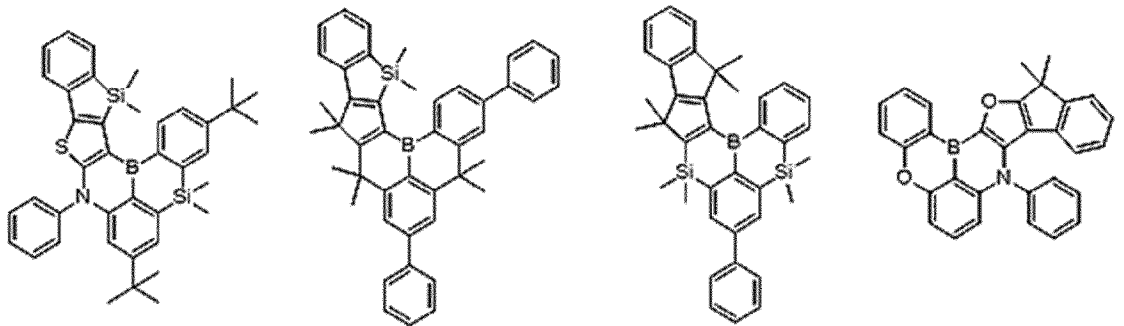
[181] [화학식49] [화학식50] [화학식51] [화학식52]

[182]



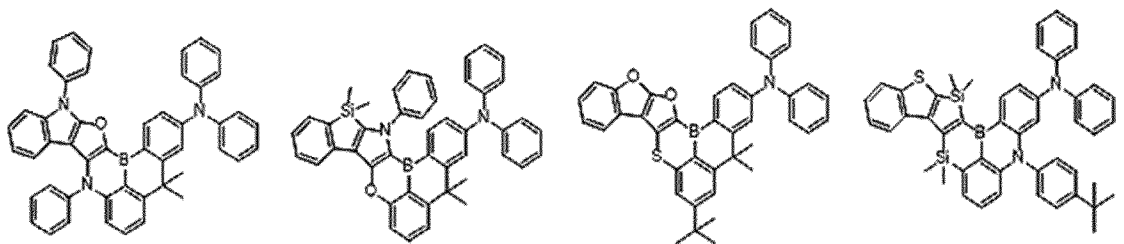
[183] [화학식53] [화학식54] [화학식55] [화학식56]

[184]



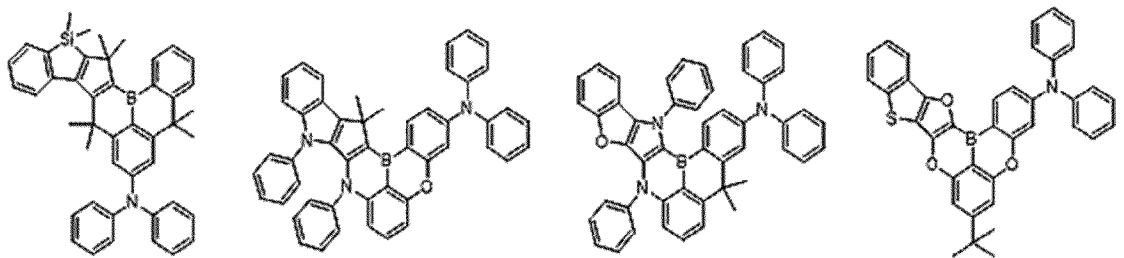
[185] [화학식57] [화학식58] [화학식59] [화학식60]

[186]



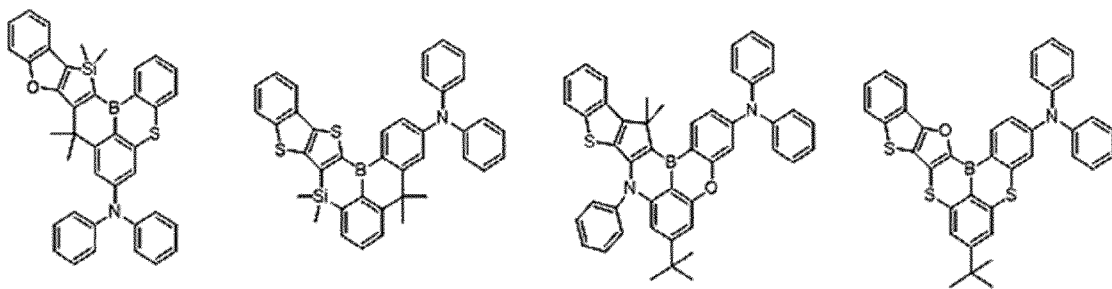
[187] [화학식61] [화학식62] [화학식63] [화학식64]

[188]



[189] [화학식65] [화학식66] [화학식67] [화학식68]

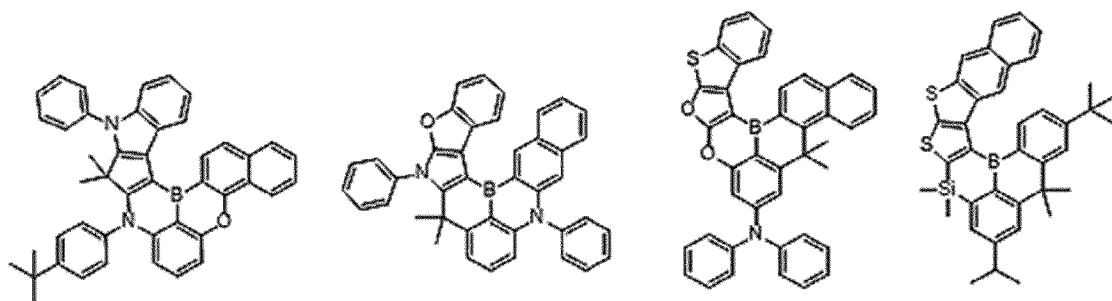
[190]



[191]

[화학식69] [화학식70] [화학식71] [화학식72]

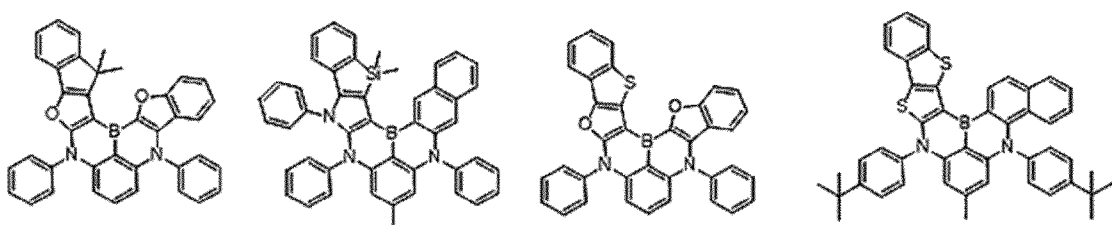
[192]



[193]

[화학식73] [화학식74] [화학식75] [화학식76]

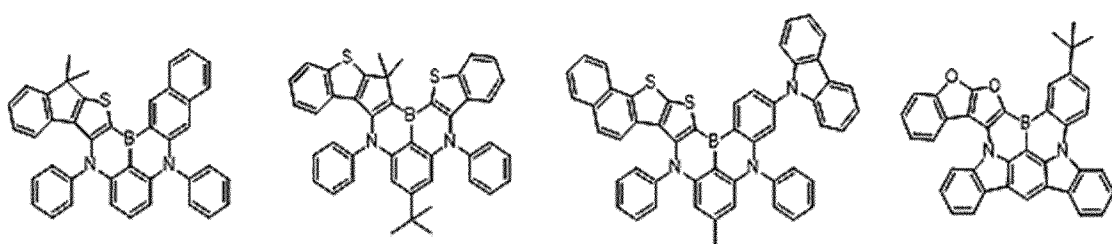
[194]



[195]

[화학식77] [화학식78] [화학식79] [화학식80]

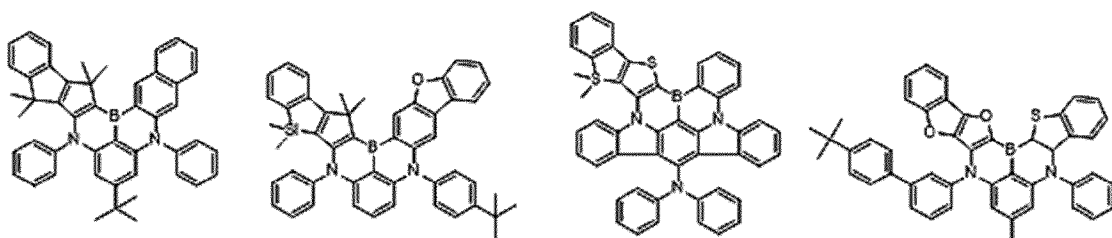
[196]



[197]

[화학식81] [화학식82] [화학식83] [화학식84]

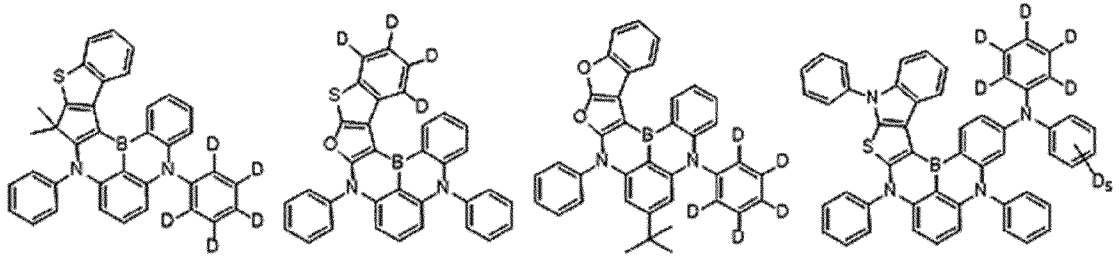
[198]



[199]

[화학식85] [화학식86] [화학식87] [화학식88]

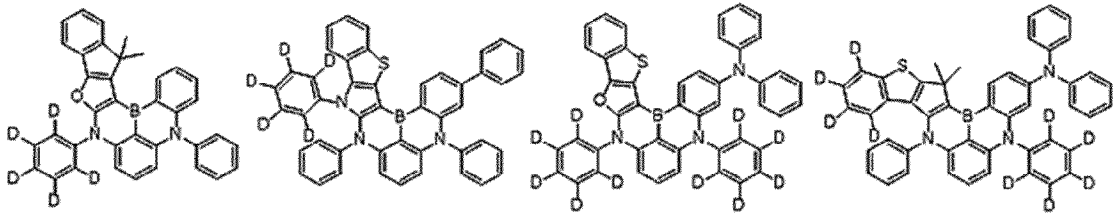
[200]



[201]

[화학식89] [화학식90] [화학식91] [화학식92]

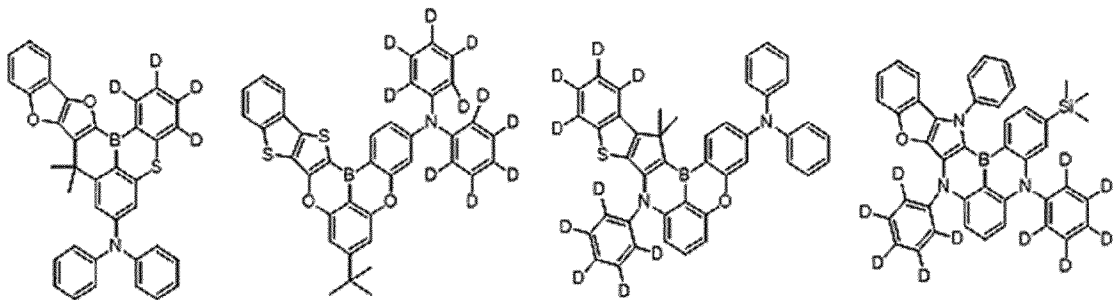
[202]



[203]

[화학식93] [화학식94] [화학식95] [화학식96]

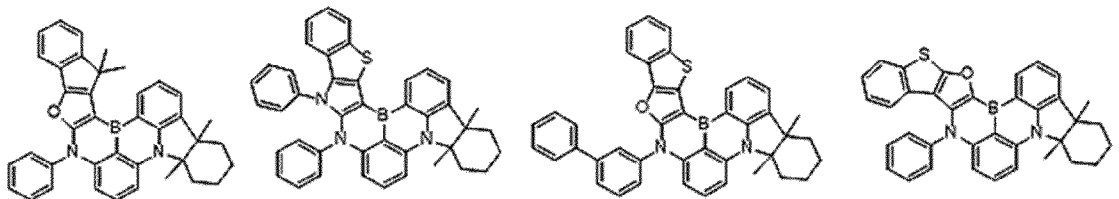
[204]



[205]

[화학식97] [화학식98] [화학식99] [화학식100]

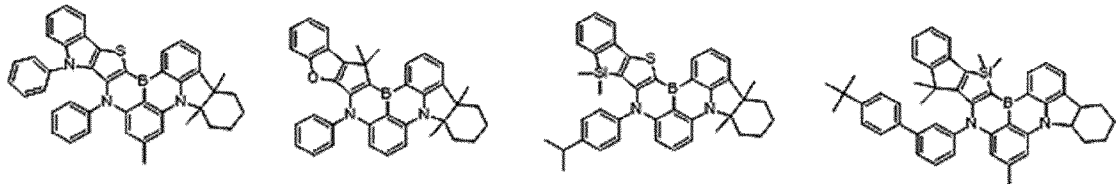
[206]



[207]

[화학식101] [화학식102] [화학식103] [화학식104]

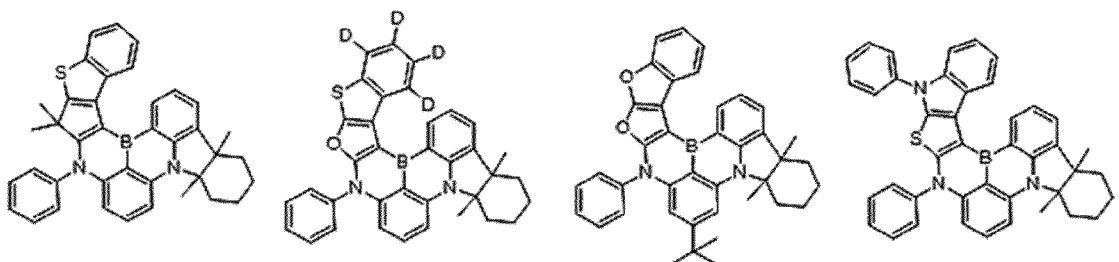
[208]



[209]

[화학식105] [화학식106] [화학식107] [화학식108]

[210]



[211]

[화학식109] [화학식110] [화학식111] [화학식112]

[212]

[213] 본 발명에 따른 상기 보론 화합물을 포함하는 유기발광소자의 일 실시예로서, 본 발명은 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 유기층;을 포함하고, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중에서 선택되는 어느 하나의 보론 화합물을 1종 이상 포함하는 유기발광소자를 제공한다.

[214] 한편, 본 발명에서 "(유기층이) 유기 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 본 발명의 범주에 속하는 1종의 유기 화합물 또는 상기 유기 화합물의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

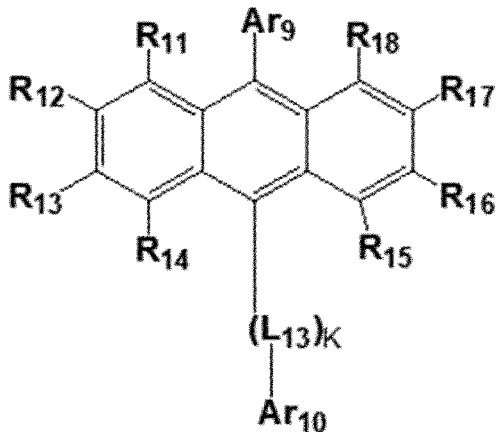
[215] 이때, 본 발명의 상기 유기발광소자는 발광층 이외에 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[216] 보다 바람직한 본 발명의 일 실시예로서, 본 발명은 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 본 발명에서의 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]로 표시되는 보론 화합물 중 적어도 하나를 발광층내 도판트로 포함할 수 있다.

[217] 일 실시예로서, 본 발명에 따른 유기발광소자에서, 상기 호스트로서는 하기 화학식 H로 표시되는 안트라센 유도체를 사용할 수 있다.

[218] [화학식 H]

[219]



[220] 상기 [화학식 H]에서

[221] 상기 치환기 R₁₁ 내지 R₁₈은 동일하거나 상이하며, 각각 앞서 기재된 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물내에서 정의된 상기 R₁ 내지 R₁₀과 동일하며;

[222] 상기 치환기 Ar₉, 및 Ar₁₀은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된

탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느 하나이며;

[223] 상기 연결기 L_{13} 은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

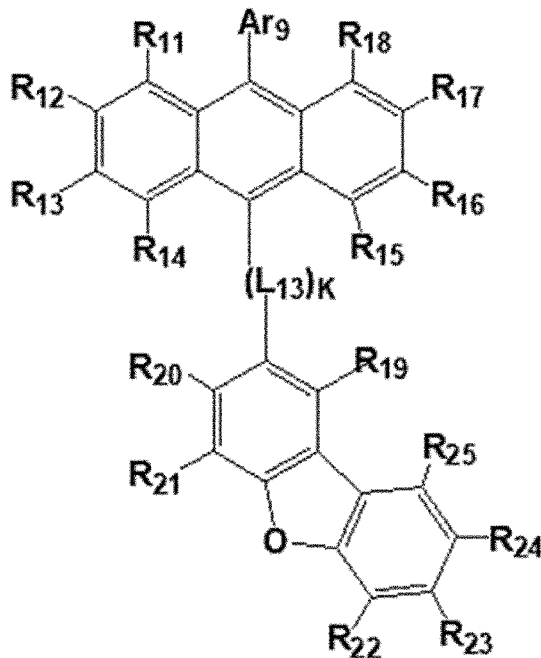
[224] 상기 k 는 1 내지 3의 정수이되, 상기 k 가 2 이상인 경우에 각각의 L_{13} 은 서로 동일하거나 상이하다.

[225]

[226] 일실시예로서, 본 발명에 따른 유기발광소자에서, 상기 호스트로서는 [화학식 H]로 표시되는 안트라센 유도체는 하기 [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]로 표시되는 안트라센 유도체를 사용할 수 있다.

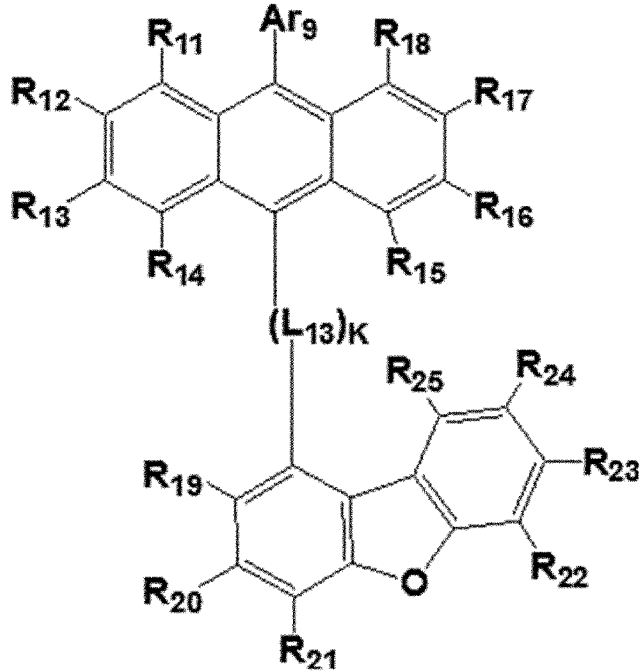
[227] [화학식 H1]

[228]



[229] [화학식 H2]

[230]



[231]

[232] 상기 [화학식 H1] 및 [화학식 H2]에서,

[233] 상기 치환기 R₁₉ 내지 R₂₅는 동일하거나 상이하며, 각각 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물내에서 정의된 상기 R₁ 내지 R₁₀과 동일하다.

[234] 여기서, 상기 [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]로 표시되는 화합물은 아래 그림 1에서와 같이, 디벤조퓨란의 어느 한쪽 페닐고리의 1번 또는 2번 위치 또는 디벤조퓨란의 다른 한쪽 페닐고리의 1'번 또는 2'번 위치가 안트라세닐기의 9번 위치에 결합되는 것을 특징으로 하며, 상기 [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]로 표시되는 화합물은 발광층내 호스트 재료로서 사용될 수 있다.

[235]

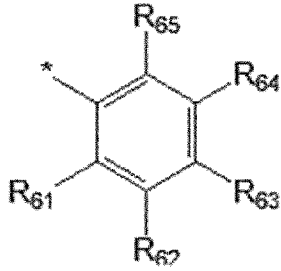
[236]  [그림 1]

[237]

[238] 한편, 본 발명에서, 상기 [화학식 H], [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]로 표시되는 안트라센 유도체내 치환기 Ar₉는 아래 [구조식 C-1] 으로 표시되는 치환기 일 수 있다.

[239] [구조식 C-1]

[240]



[241]

[242] 이때, 상기 [구조식 C-1] 내의 R_{61} 내지 R_{65} 은 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 50의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느하나이고,

[243] 상기 [구조식 C-1]에서의 '*'는 [화학식 H], [화학식 H1] 또는 [화학식 H2] 내 안트라세닐기의 10번 위치에 결합되는 결합사이트이다.

[244]

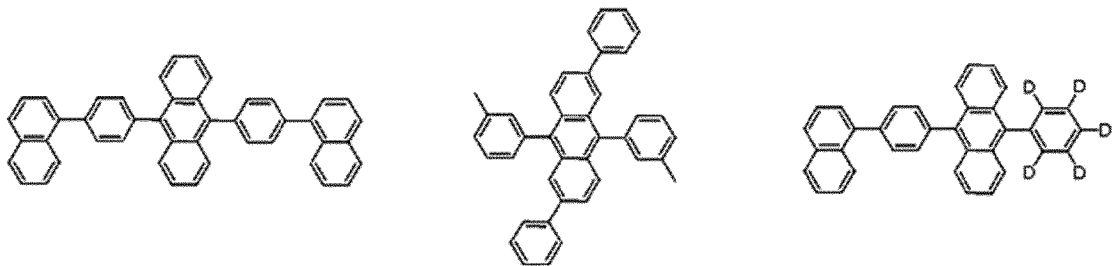
[245] 일실시예로서, 본 발명에 따른 유기발광소자에서, 상기 [화학식 H], [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]내 연결기 L_{13} 은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기일 수 있으며, 이때, 상기 k 는 1 내지 2의 정수이되, 상기 k 가 2 이상인 경우에 각각의 L_{13} 은 서로 동일하거나 상이하다.

[246]

[247] 본 발명에 따른 유기발광소자내 상기 [화학식 H]로 표시되는 안트라센 유도체는 하기 <화합물 101> 내지 <화합물 166> 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

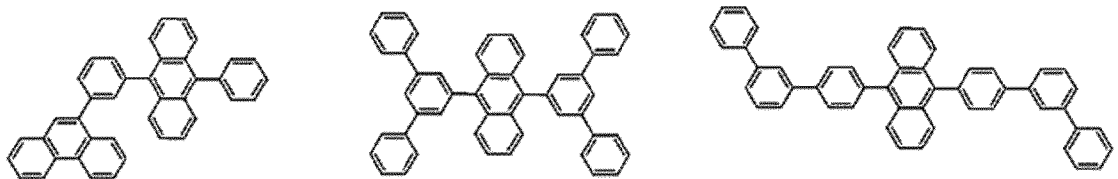
[248] <화합물 101> <화합물 102> <화합물 103>

[249]



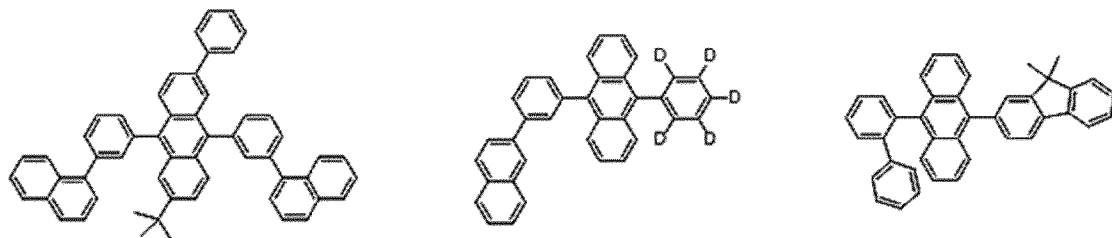
[250] <화합물 104> <화합물 105> <화합물 106>

[251]



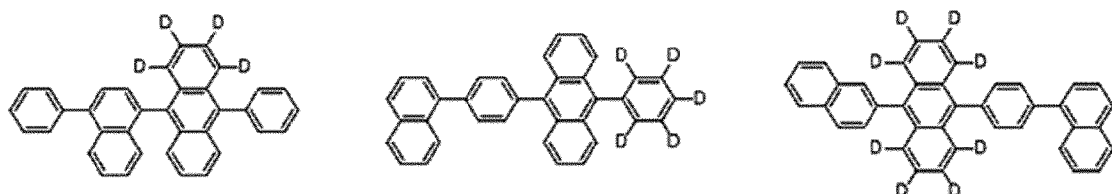
[252] <화합물 107> <화합물 108> <화합물 109>

[253]



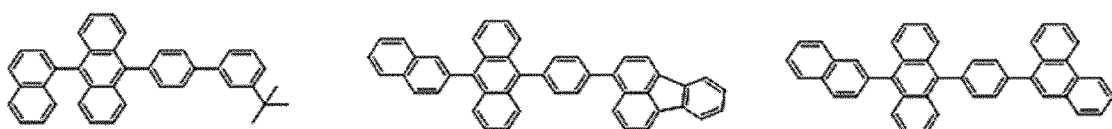
[254] <화합물 110> <화합물 111> <화합물 112>

[255]



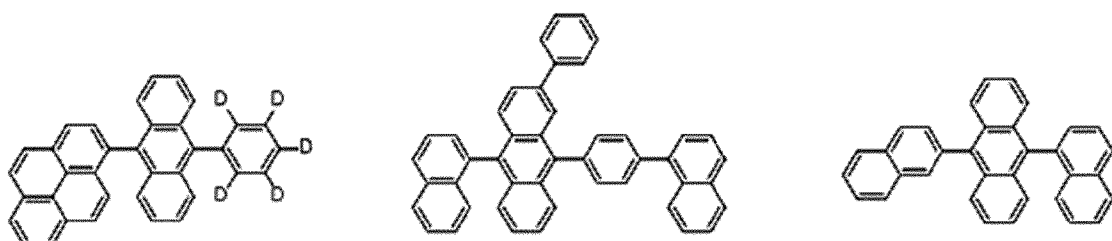
[256] <화합물 113> <화합물 114> <화합물 115>

[257]



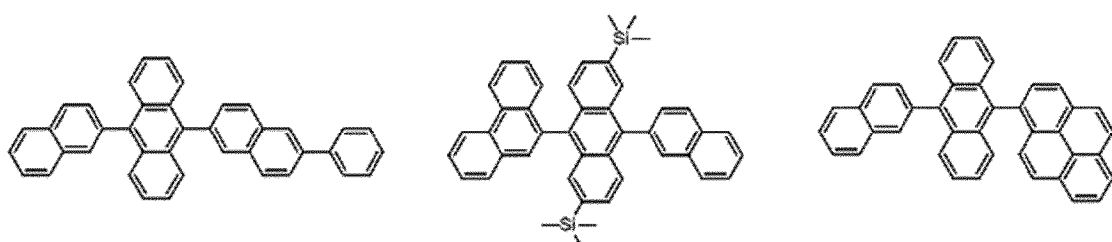
[258] <화합물 116> <화합물 117> <화합물 118>

[259]



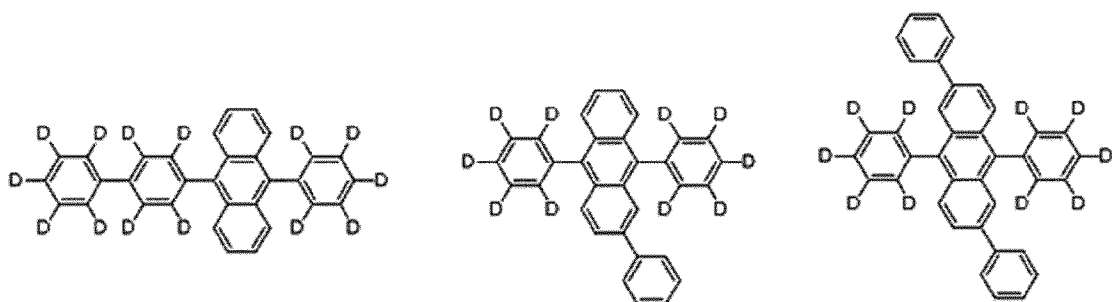
[260] <화합물 119> <화합물 120> <화합물 121>

[261]



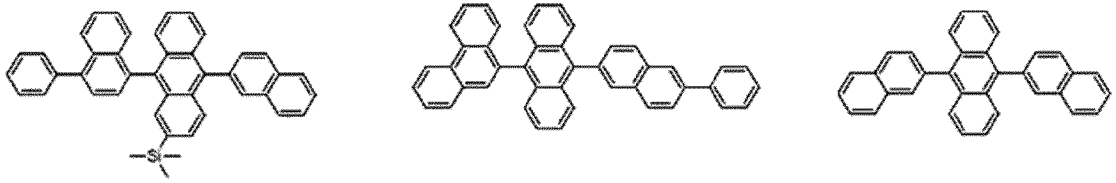
[262] <화합물 122> <화합물 123> <화합물 124>

[263]



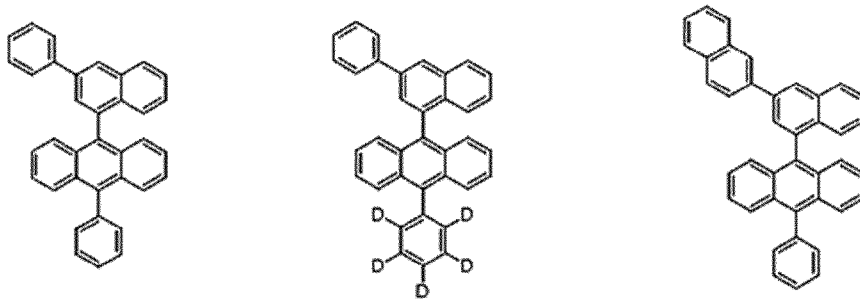
[264] <화합물 125> <화합물 126> <화합물 127>

[265]



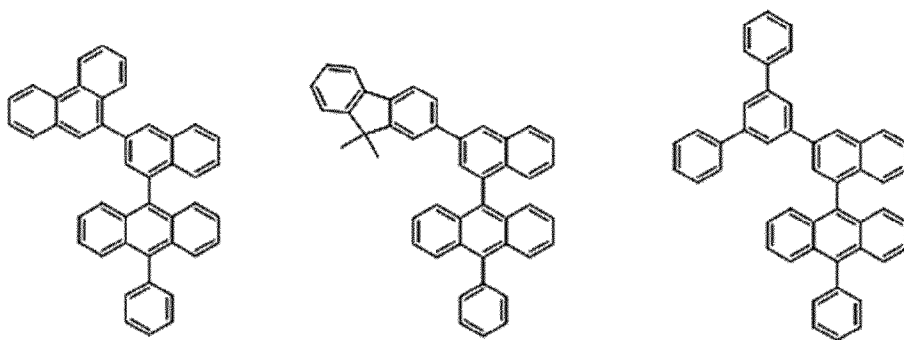
[266] <화합물 128> <화합물 129> <화합물 130>

[267]



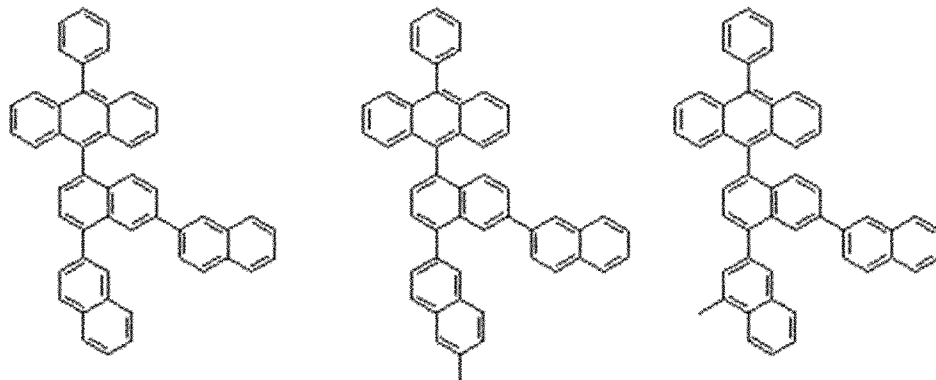
[268] <화합물 131> <화합물 132> <화합물 133>

[269]



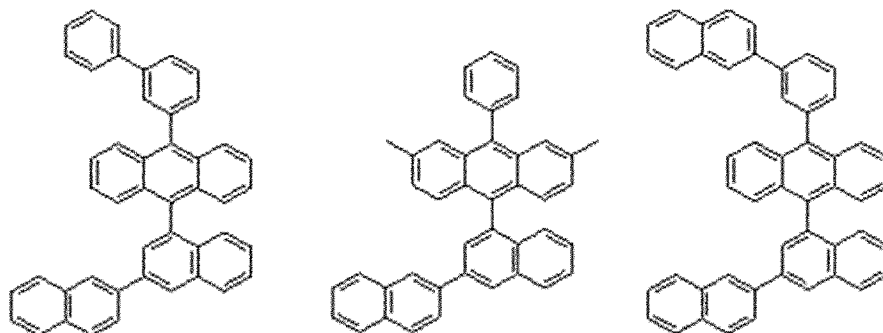
[270] <화합물 134> <화합물 135> <화합물 136>

[271]



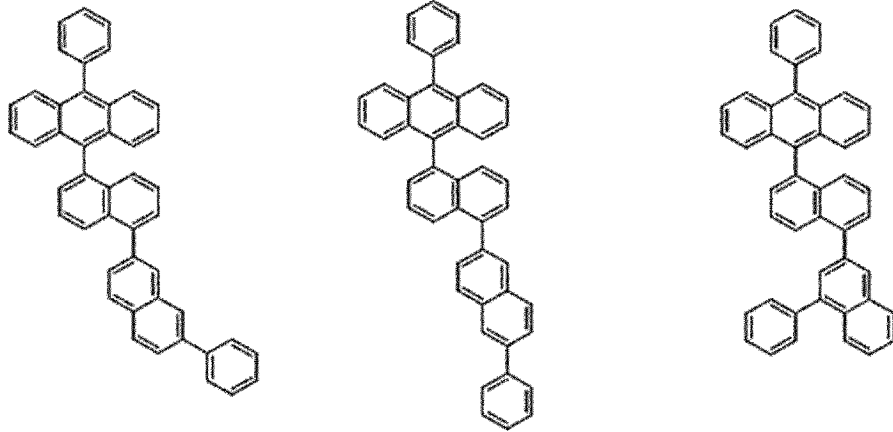
[272] <화합물 137> <화합물 138> <화합물 139>

[273]



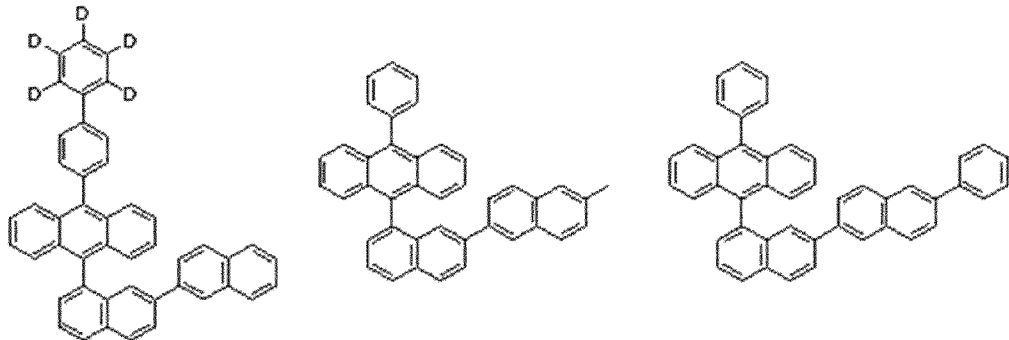
[274] <화합물 140> <화합물 141> <화합물 142>

[275]



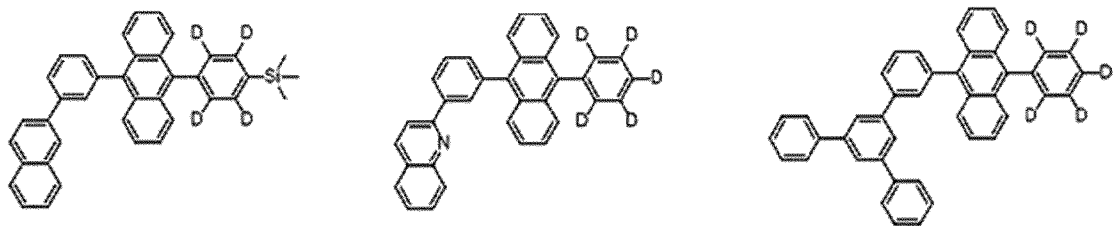
[276] <화합물 143> <화합물 144> <화합물 145>

[277]



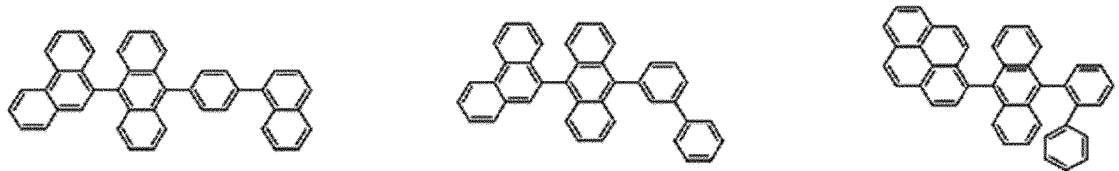
[278] <화합물 146> <화합물 147> <화합물 148>

[279]



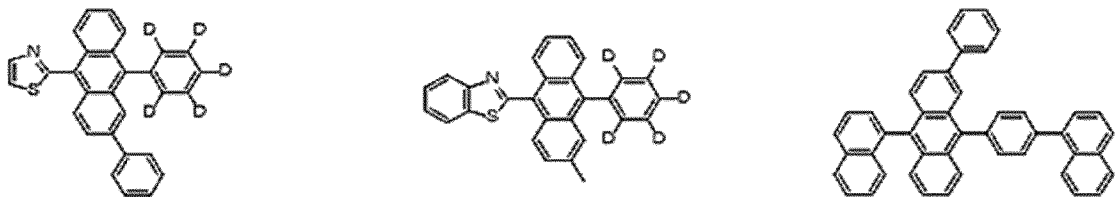
[280] <화합물 149> <화합물 150> <화합물 151>

[281]



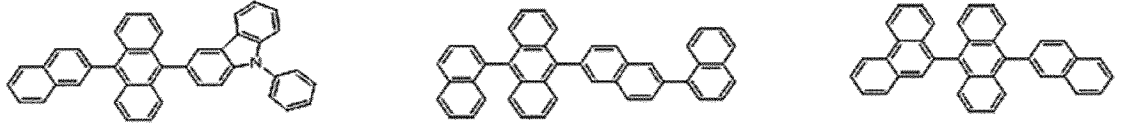
[282] <화합물 152> <화합물 153> <화합물 154>

[283]



[284] <화합물 155> <화합물 156> <화합물 157>

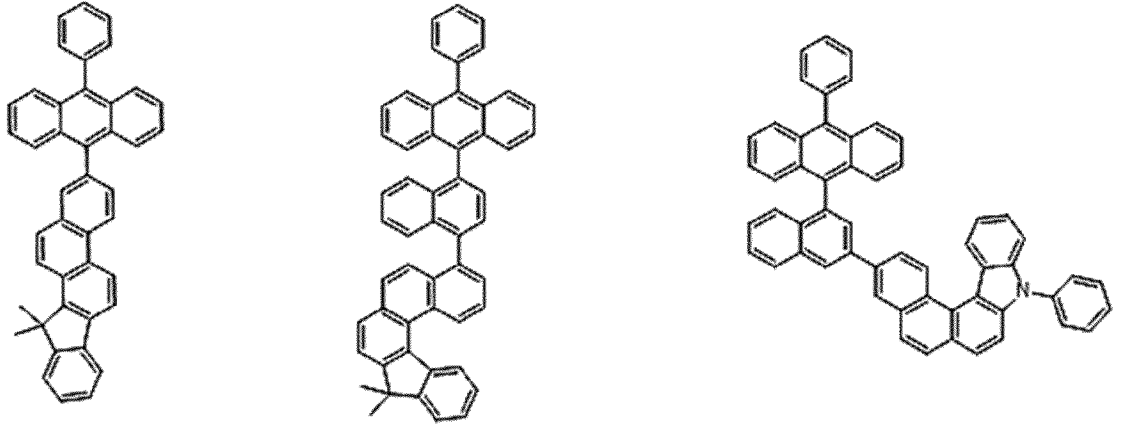
[285]



[286]

<화합물 158> <화합물 159> <화합물 160>

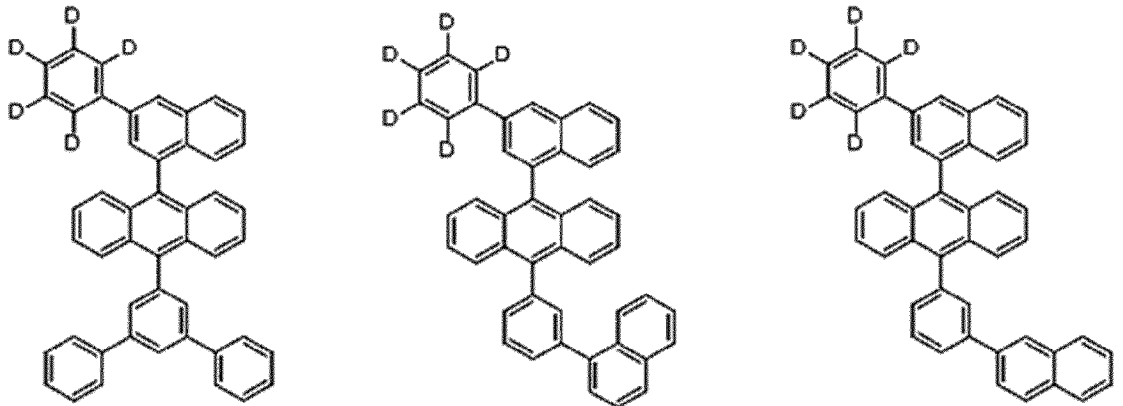
[287]



[288]

<화합물 161> <화합물 162> <화합물 163>

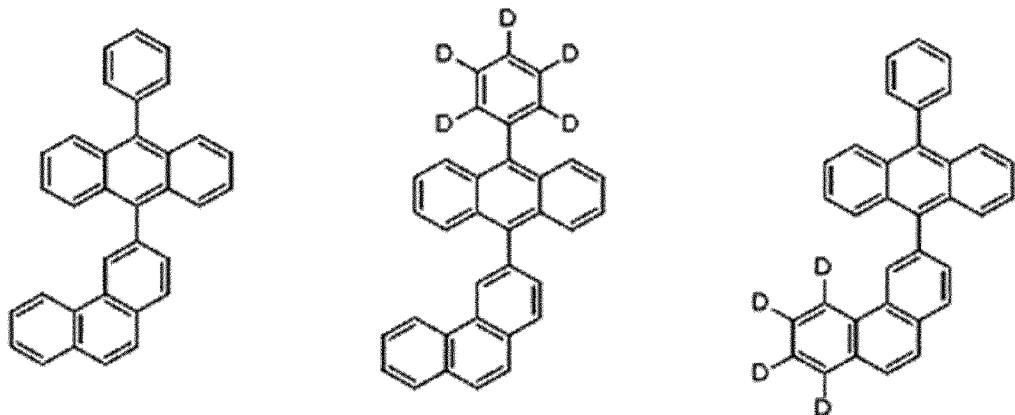
[289]



[290]

<화합물 164> <화합물 165> <화합물 166>

[291]



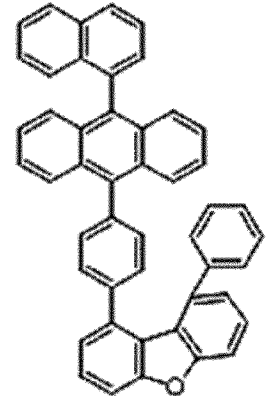
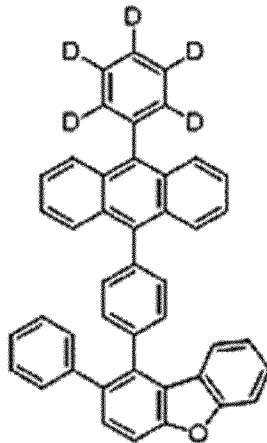
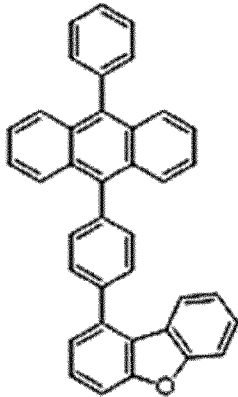
[292]

[293]

또 다른 일 실시예로서, 본 발명에 따른 유기발광소자내 상기 [화학식 H1] 및 [화학식 H2] 중에서 어느 하나로 표시되는 안트라센 유도체는 하기 <화합물 201> 내지 <화합물 281> 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

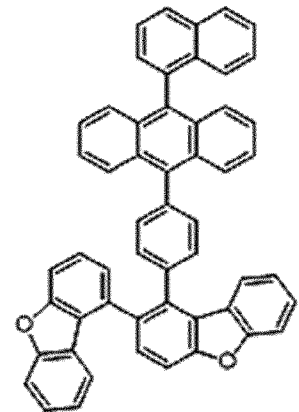
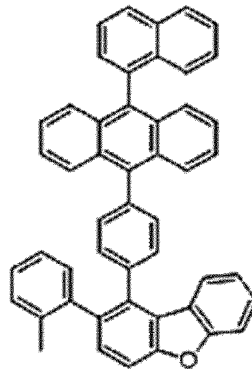
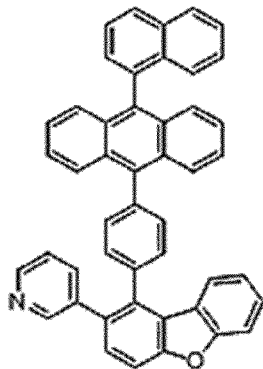
[294] <화합물 201><화합물 202><화합물 203>

[295]



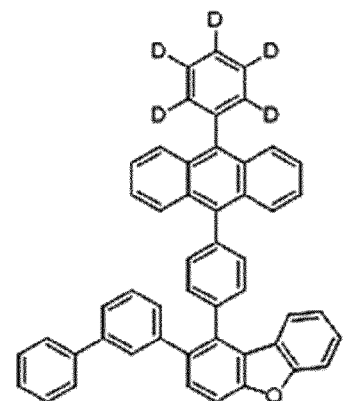
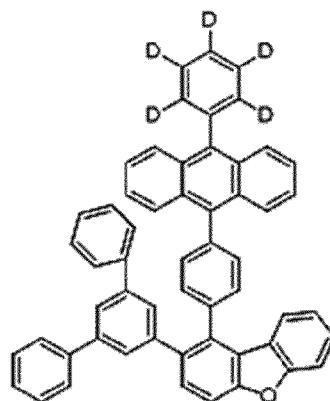
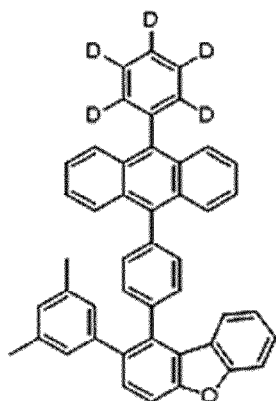
[296] <화합물 204><화합물 205><화합물 206>

[297]



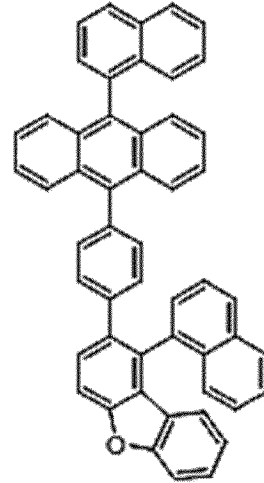
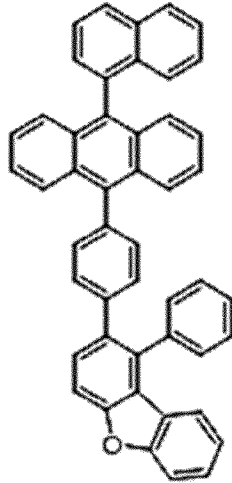
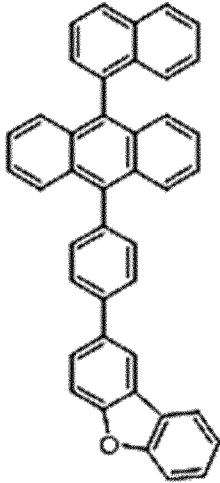
[298] <화합물 207><화합물 208><화합물 209>

[299]



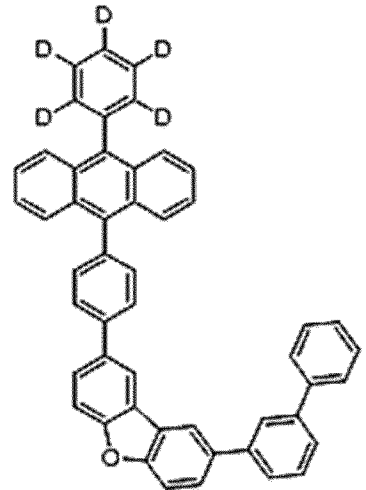
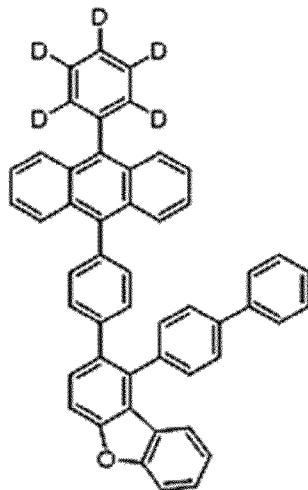
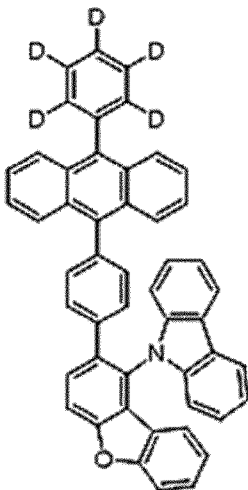
[300] <화합물 210><화합물 211><화합물 212>

[301]



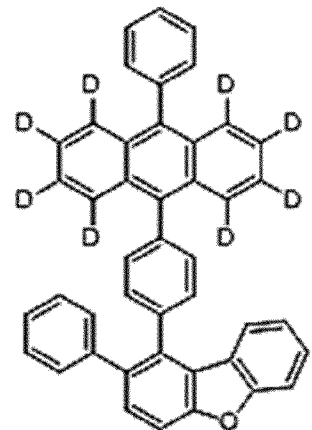
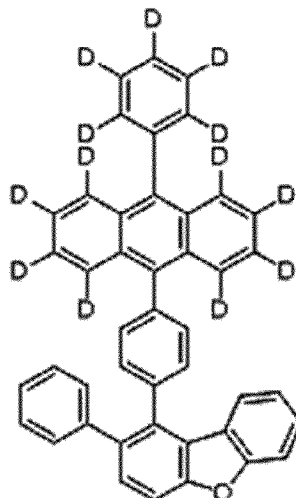
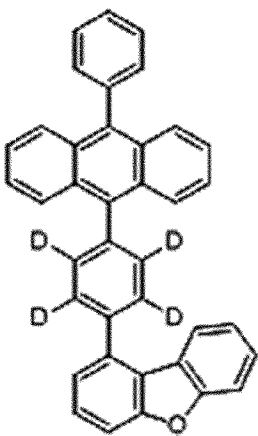
[302] <화합물 213><화합물 214><화합물 215>

[303]



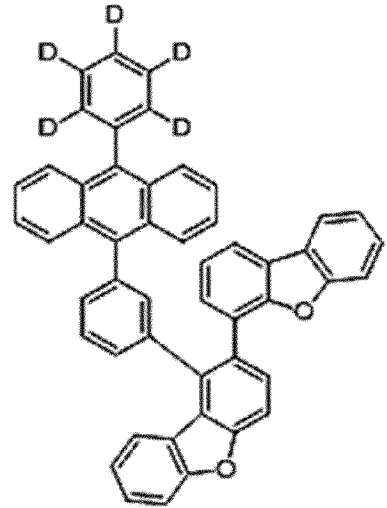
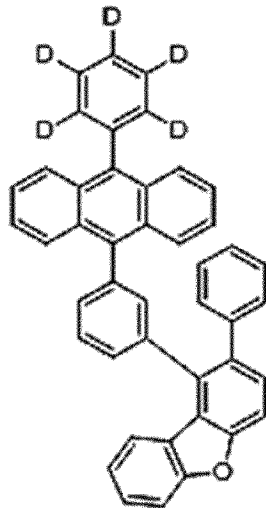
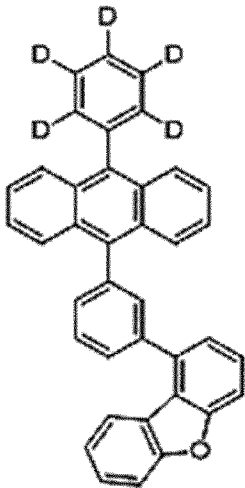
[304] <화합물 216><화합물 217><화합물 218>

[305]



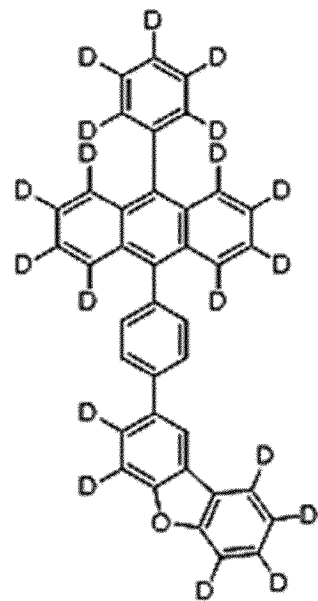
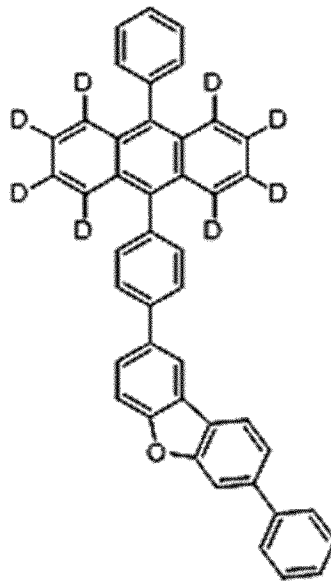
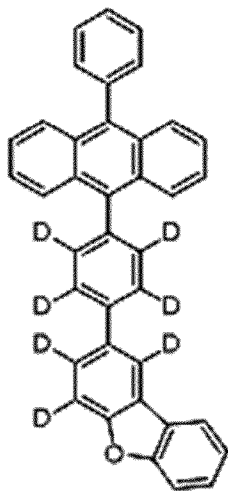
[306] <화합물 219><화합물 220><화합물 221>

[307]



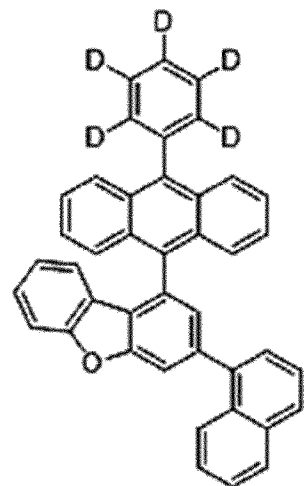
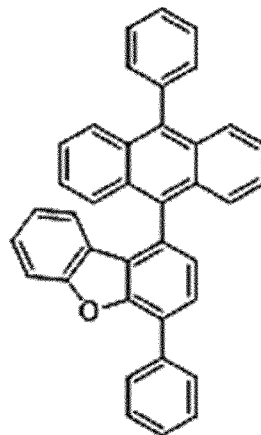
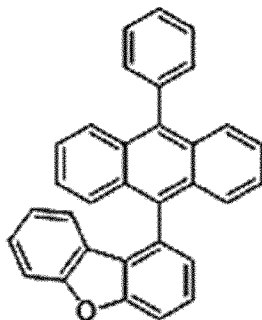
[308] <화합물 222><화합물 223><화합물 224>

[309]



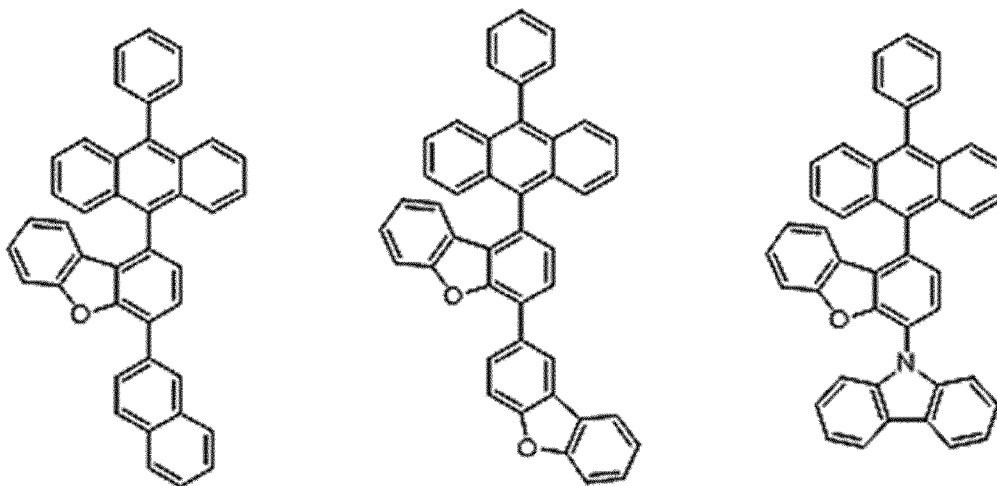
[310] <화합물 225><화합물 226><화합물 227>

[311]



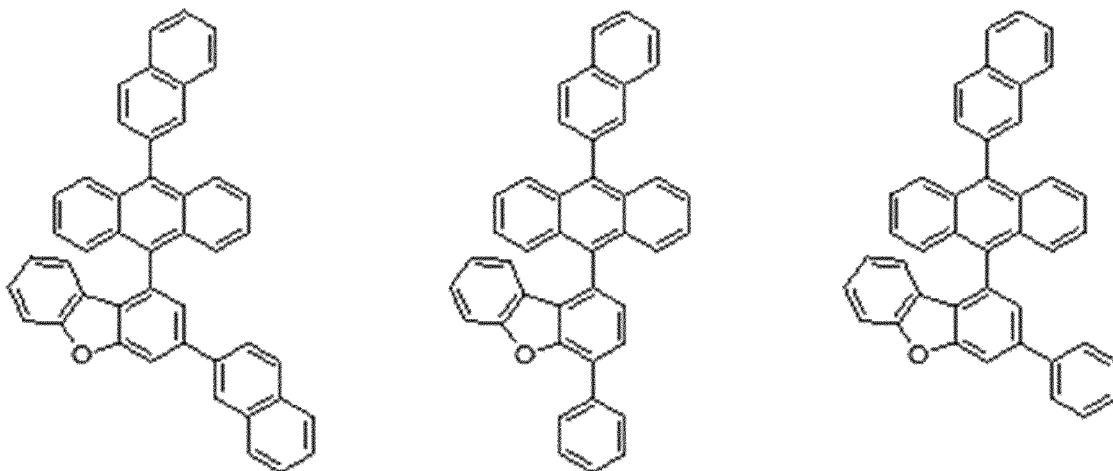
[312] <화합물 228><화합물 229><화합물 230>

[313]



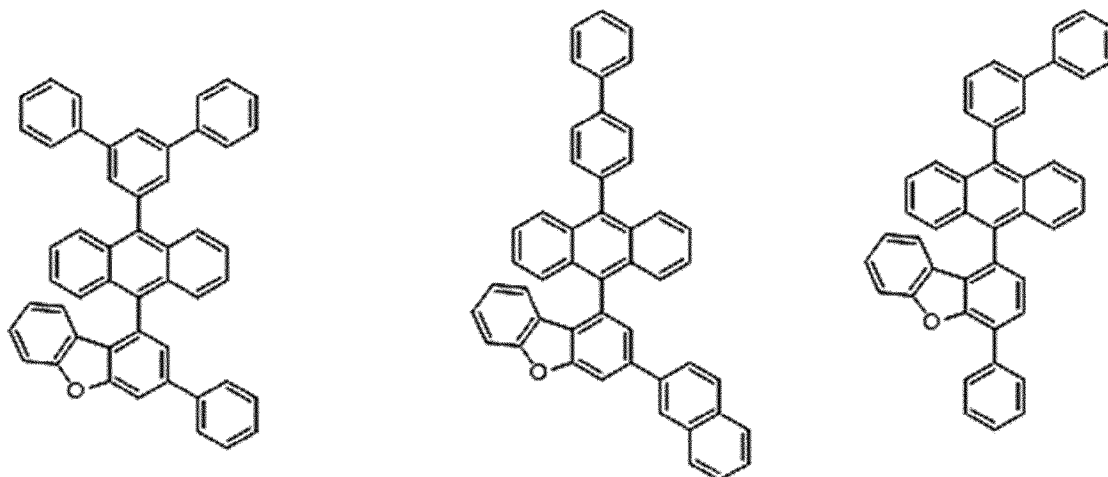
[314] <화합물 231><화합물 232><화합물 233>

[315]



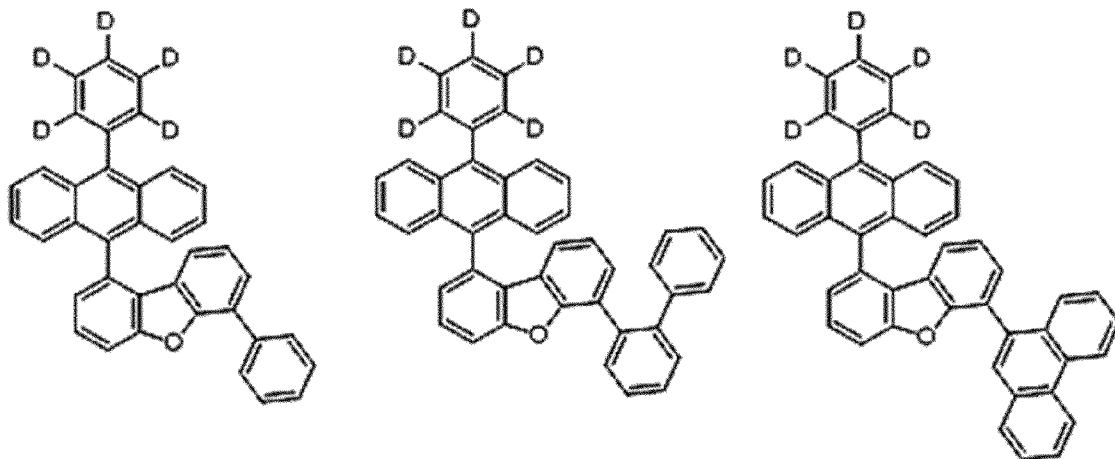
[316] <화합물 234><화합물 235><화합물 236>

[317]



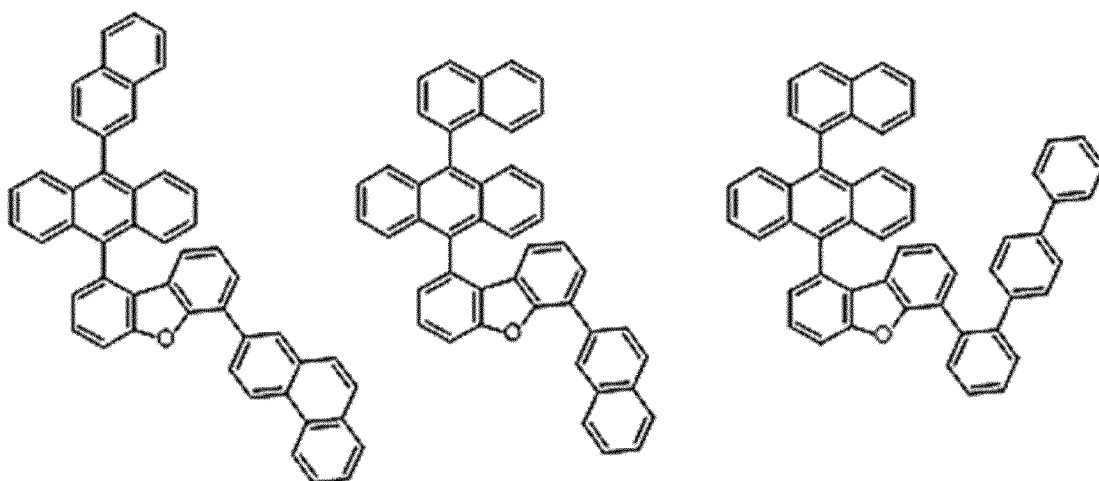
[318] <화합물 237><화합물 238><화합물 239>

[319]



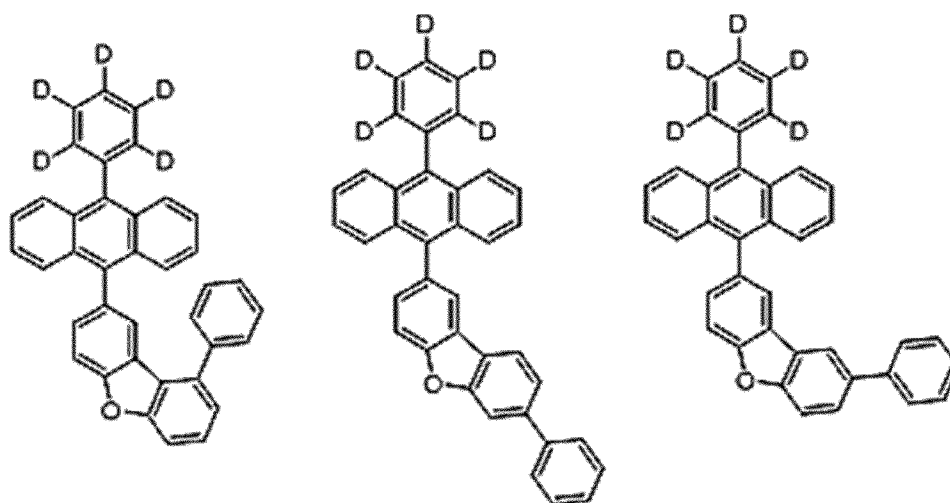
[320] <화합물 240><화합물 241><화합물 242>

[321]



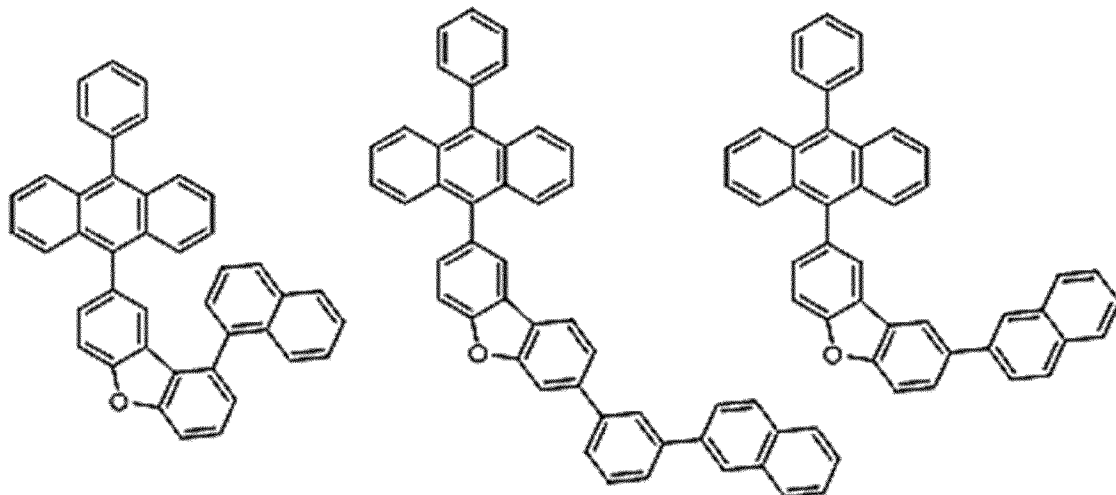
[322] <화합물 243><화합물 244><화합물 245>

[323]



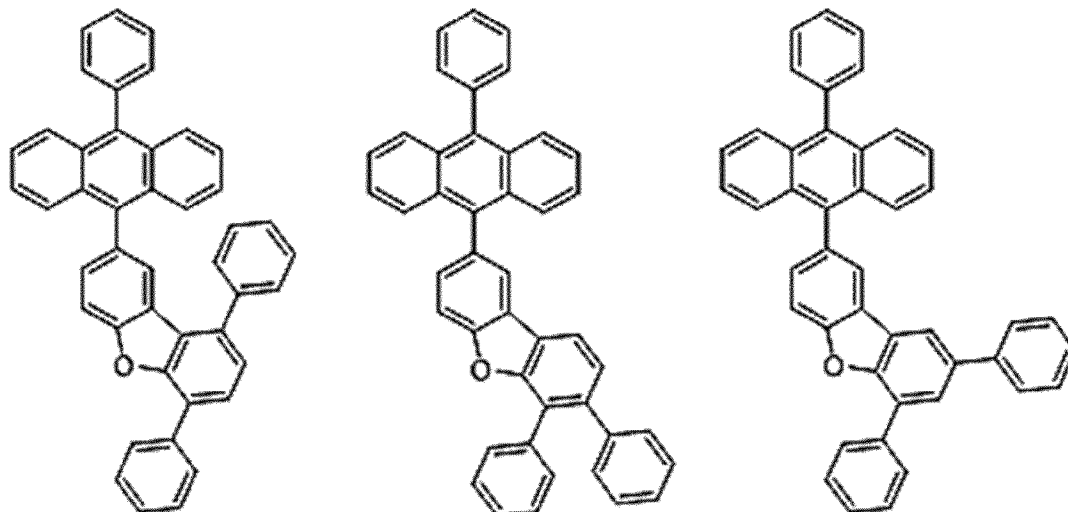
[324] <화합물 246><화합물 247><화합물 248>

[325]



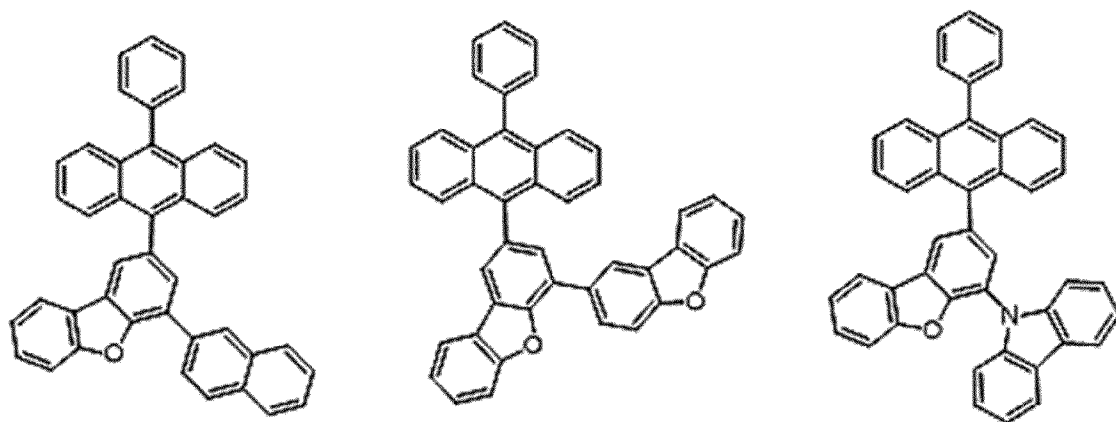
[326] <화합물 249><화합물 250><화합물 251>

[327]



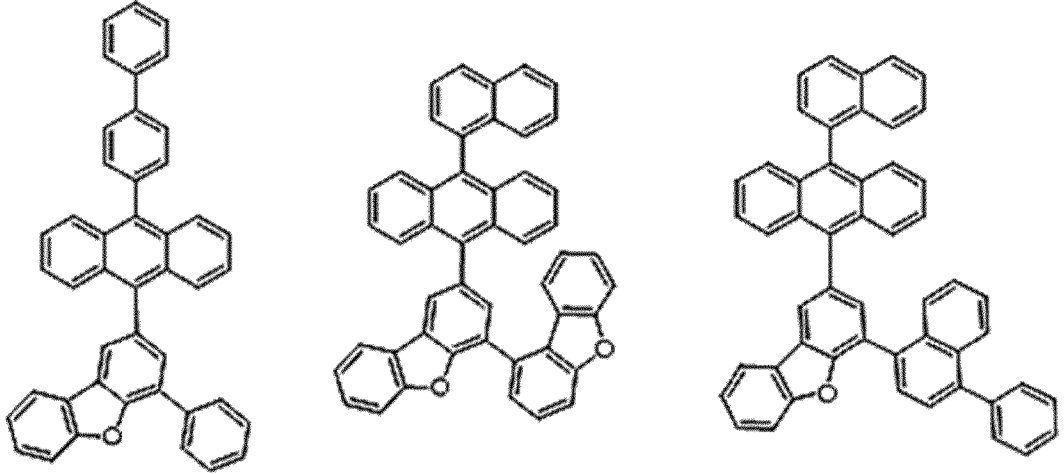
[328] <화합물 252><화합물 253><화합물 254>

[329]



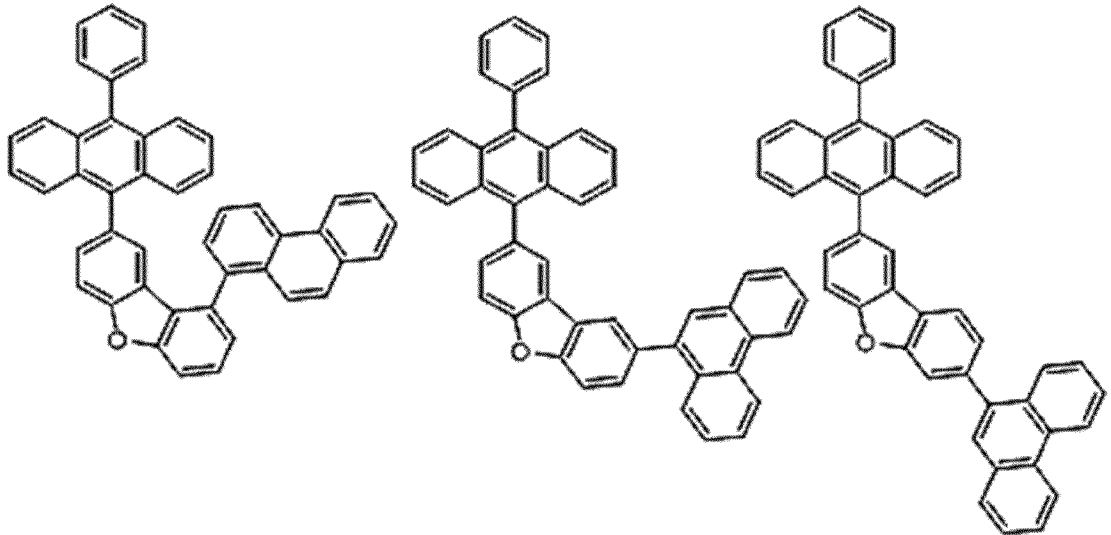
[330] <화합물 255><화합물 256><화합물 257>

[331]



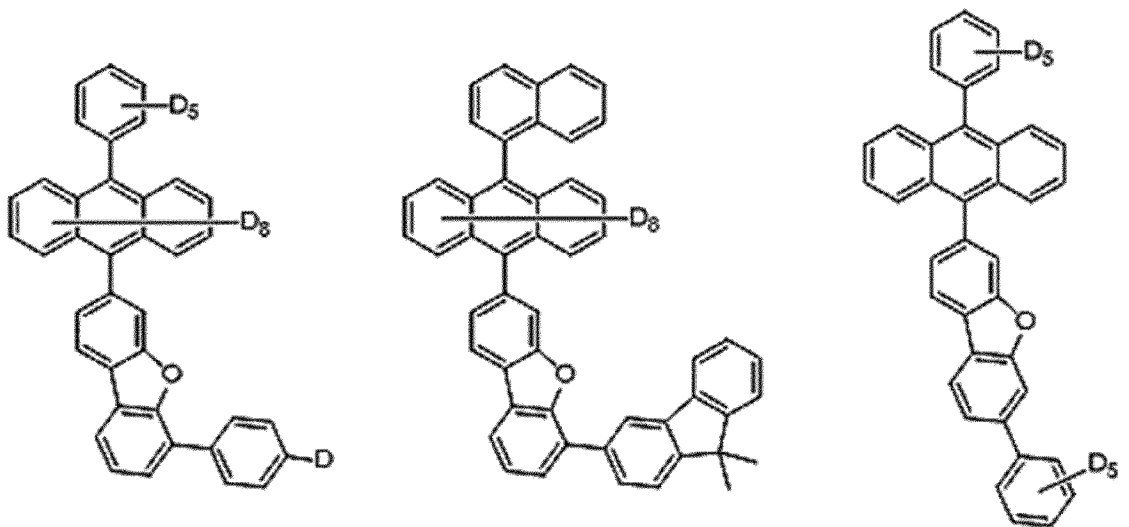
[332] <화합물 258><화합물 259><화합물 260>

[333]



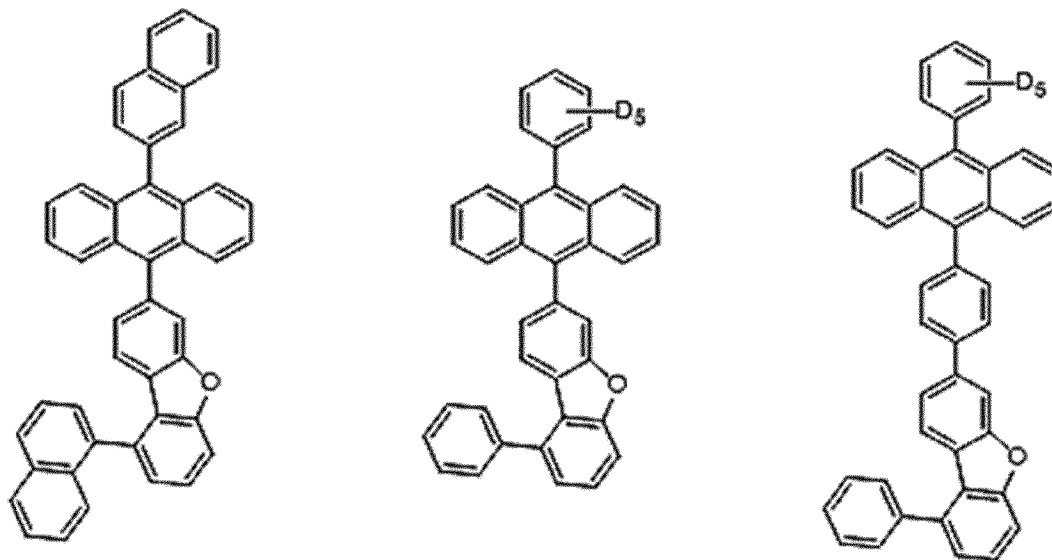
[334] <화합물 261><화합물 262><화합물 263>

[335]



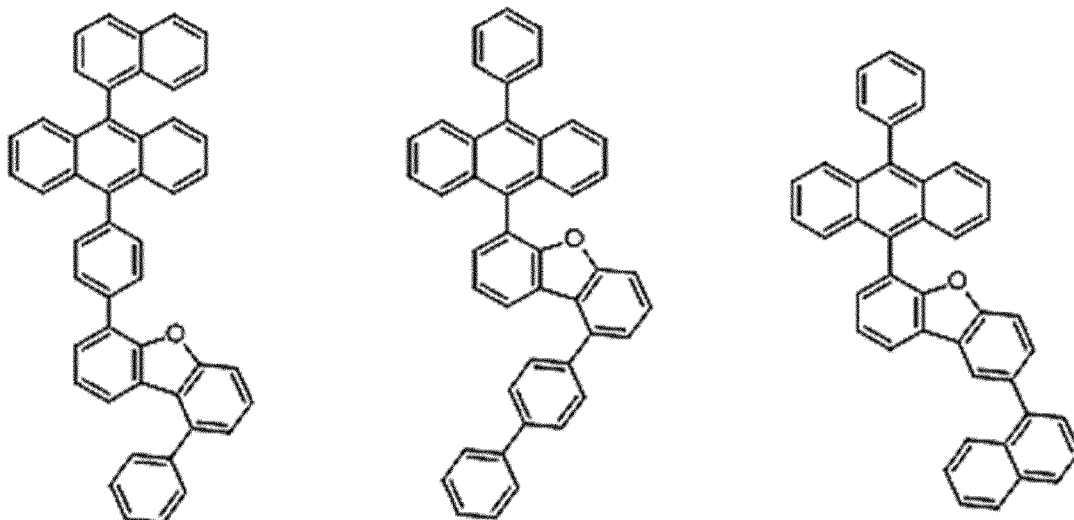
[336] <화합물 264><화합물 265><화합물 266>

[337]



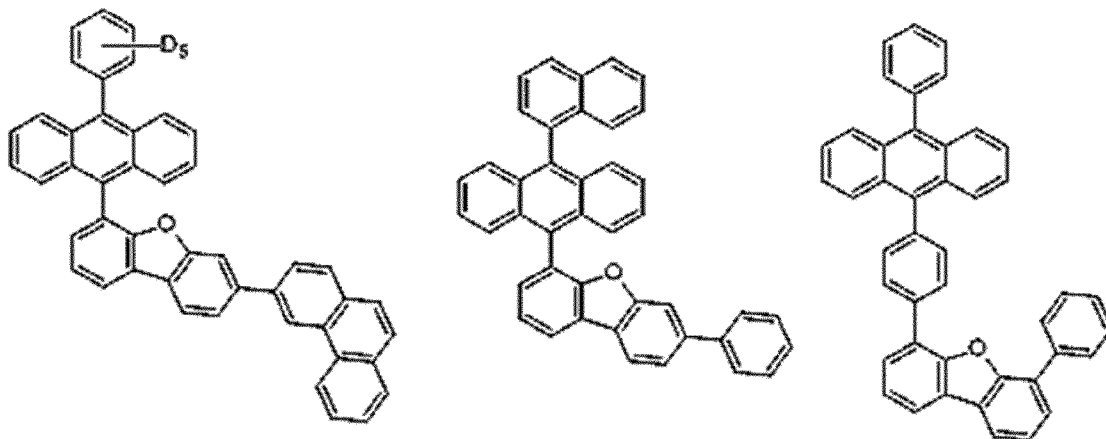
[338] <화합물 267><화합물 268><화합물 269>

[339]



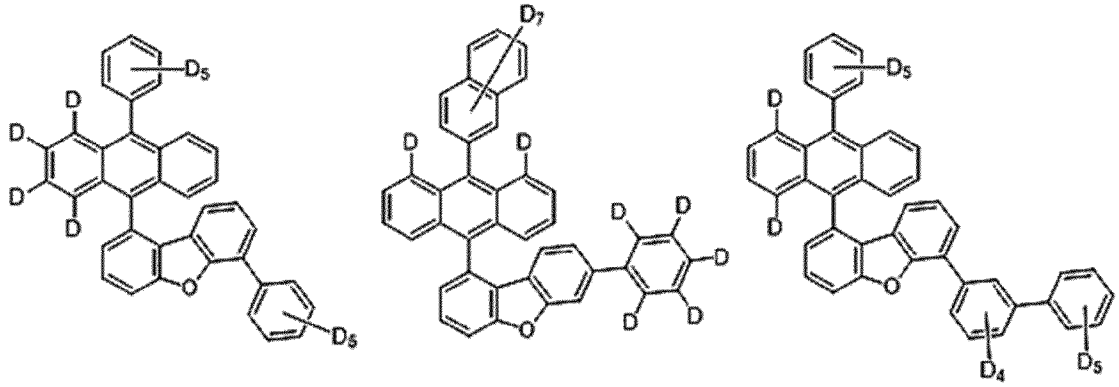
[340] <화합물 270><화합물 271><화합물 272>

[341]



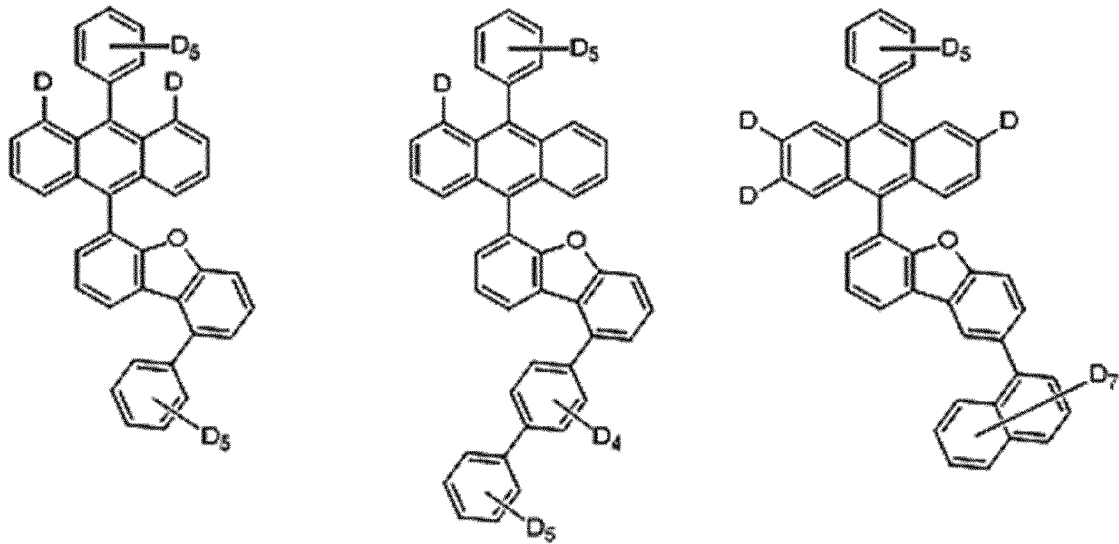
[342] <화합물 273><화합물 274><화합물 275>

[343]



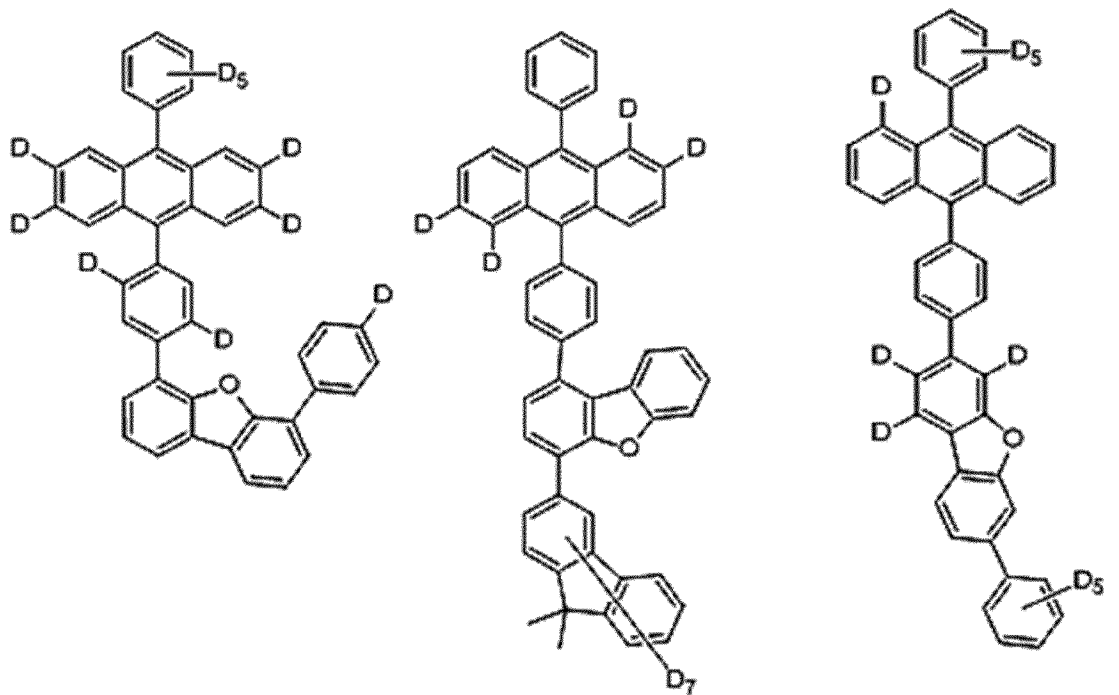
[344] <화합물 276><화합물 277><화합물 278>

[345]



[346] <화합물 279><화합물 280><화합물 281>

[347]



[348]

[349] 보다 바람직한 본 발명의 일 실시예로서, 본 발명은 제1전극으로서 양극, 제1전극에 대향된 제2전극으로서 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 발광층;을 포함하고, 본 발명에서의 상기 [화학식 A] 내지 [화학식D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물을 발광층내 도판트로서 포함하며, 또한 상기 [화학식 H]로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 발광층내 호스트로서 포함하는 유기발광소자일 수 있고 이러한 구조적 특징에 따라 본 발명에서 다른 유기발광소자는 저전압 구동 및 고효율 특성을 가질 수 있다.

[350] 이때, 상기 발광층내 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[351] 또한 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도판트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[352]

[353] 이하, 도면을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자를 설명한다.

[354] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 도시한 그림이다.

[355] 도 1에 도시된 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 유기 발광 소자는 양극(20), 정공수송층(40), 호스트 및 도판트를 포함하는 발광층(50), 전자수송층(60) 및 음극(80)을 순차적 순서로 포함하는 유기발광소자로서, 상기 양극을 제1전극으로, 음극을 제2전극으로 하여, 상기 양극과 발광층 사이에 정공수송층을 포함하고, 발광층과 음극 사이에 전자수송층을 포함한 유기발광소자에 해당한다.

[356] 또한, 본 발명의 실시예에 따른 유기 발광 소자는 상기 양극(20)과 정공수송층(40) 사이에 정공주입층(30)이 포함되며, 상기 전자수송층(60)과 음극(80) 사이에 전자주입층(70)이 포함될 수 있다.

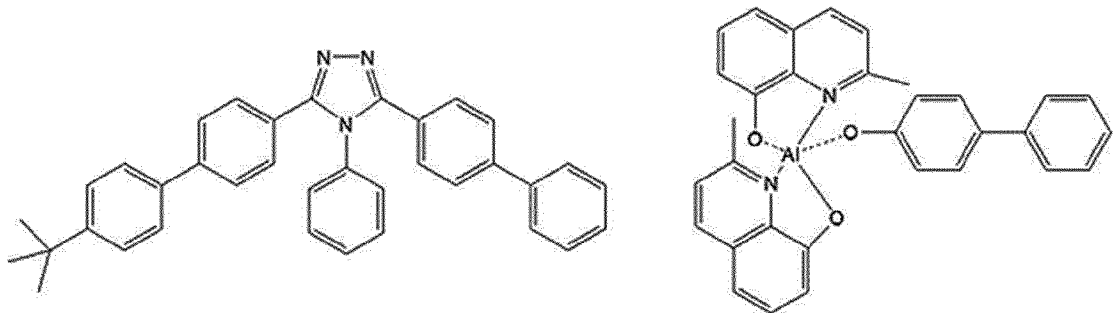
[357] 상기 도 1을 참조하여 본 발명의 유기 발광 소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다.

[358] 먼저 기판(10) 상부에 양극(애노드) 전극용 물질을 코팅하여 양극(20)을 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 양극 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[359] 상기 양극(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착, 또는 스펀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스펀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

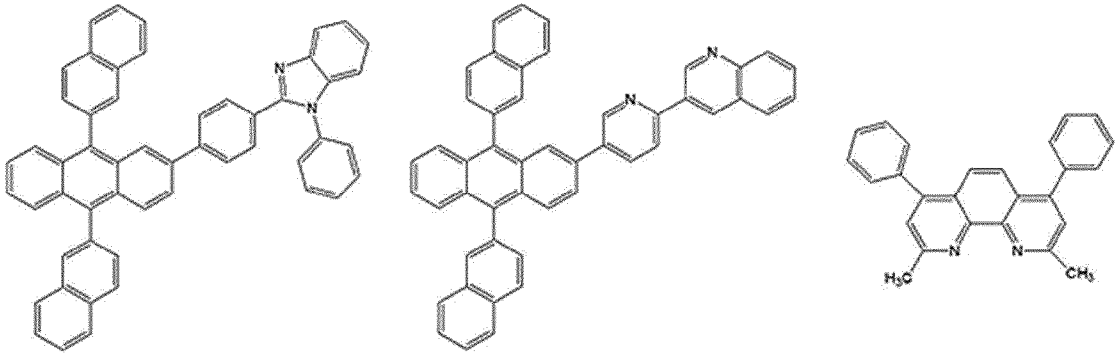
[360] 상기 정공주입층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히

- 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 2-TNATA [4,4',4''-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다. 하지만 본 발명이 반드시 이에 한정되는 것은 아니다.
- [361] 또한 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘(a-NPD) 등을 사용할 수 있다. 하지만 본 발명이 반드시 이에 한정되는 것은 아니다.
- [362] 한편, 본 발명은 상기 정공 수송층 상부에 전자 차단층을 추가적으로 형성할 수 있다. 상기 전자차단층은 전자주입층으로부터 주입된 전자가 발광층을 지나 정공수송층으로 진입하는 것을 방지하여 소자의 수명과 효율을 향상시키기 위한 층으로서, 발광층과 정공주입층의 사이에 적절한 부분에 형성될 수 있으며, 바람직하게는 발광층과 정공수송층 사이에 형성될 수 있다.
- [363] 이어서, 상기 정공수송층(40) 또는 전자차단층의 상부에 발광층(50)을 진공 증착 방법, 또는 스펀 코팅 방법으로서 적층할 수 있다.
- [364] 여기서, 상기 발광층은 호스트와 도펀트로 이루어질 수 있으며, 이들을 구성하는 재료에 대해서는 앞서 기재한 바와 같다.
- [365] 또한, 본 발명의 구체적인 예에 의하면, 상기 발광층의 두께는 50 내지 2,000 Å인 것이 바람직하다.
- [366] 한편, 상기 발광층 상에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스펀 코팅 방법을 통해 증착한다.
- [367] 한편 본 발명에서 상기 전자수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자수송물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자수송물질의 예로는, 퀴놀린유도체, 특히트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq₃), Liq, TAZ, BAlq, 베릴륨비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), 화합물 201, 화합물 202, BCP, 옥사디아졸유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [368]



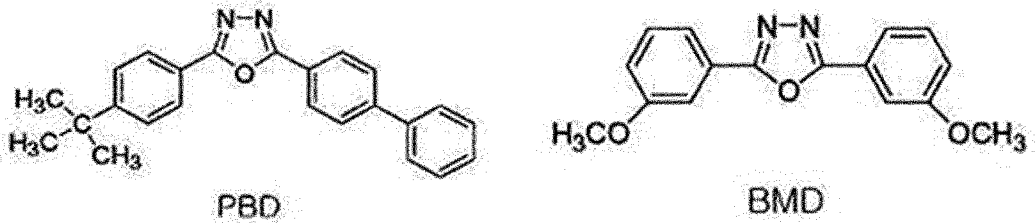
[369] TAZ BAlq

[370]

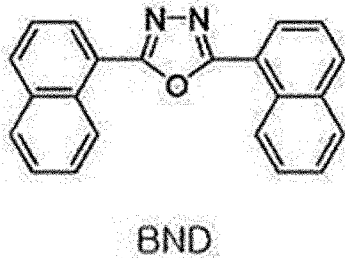


[371] <화합물 201> <화합물 202> BCP

[372]



[373]



[374] 또한, 본 발명에서의 유기발광소자는 상기 전자수송층을 형성한 후에 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[375] 상기 전자 주입층 형성재료로는 CsF, NaF, LiF, Li₂O, BaO등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[376] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1 Å 내지 약 100 Å, 약 3 Å 내지 약 90 Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[377] 또한, 본 발명에서 상기 음극은 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질을 이용할 수 있다. 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 또는 이들의 합금

알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용하거나, ITO, IZO를 사용한 투과형 음극을 사용할 수 있다.

[378] 또한 본 발명에서의 유기 발광 소자는 380 nm 내지 800 nm의 파장범위에서 발광하는 청색 발광재료, 녹색 발광재료 또는 적색 발광재료의 발광층을 추가적으로 포함할 수 있다. 즉, 본 발명에서의 발광층은 복수의 발광층으로서, 상기 추가적으로 형성되는 발광층내 청색 발광재료, 녹색 발광재료 또는 적색 발광재료는 형광재료 또는 인광재료일 수 있다.

[379] 또한, 본 발명에서 상기 각각의 층중에서 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착공정 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있다.

[380] 여기서 상기 증착 공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 롤투롤 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[381] 또한 본 발명에서의 상기 유기 발광 소자는 평판 디스플레이 장치; 플렉시블 디스플레이 장치; 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치; 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치;에서 선택되는 어느 하나의 장치에 사용될 수 있다.

[382]

[383] 이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[384] (실시예)

[385]

[386] **합성예 1: 화학식 31의 합성**

[387] 합성예 1-(1): <중간체 1-a>의 합성

[388]



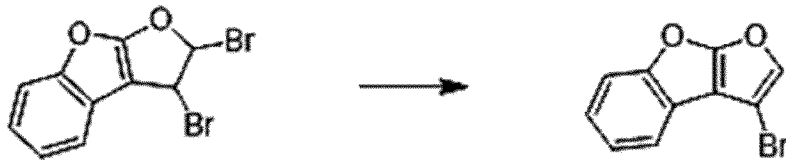
[389] <중간체 1-a>

[390] 반응기에 퓨로[2,3,-b]벤조퓨란 33.2 g (210 mmol), 디클로로메탄 250 mL를 넣고 교반한다. -10 °C로 냉각한 후, 브로민 33.6 g (210 mmol)를 디클로로메탄 50 mL에 희석하여 적가한 후 0 °C에서 2 시간 동안 교반한다. 반응종료 후 소듐티오설피이트 수용액을 넣고 교반한 후 추출한다. 유기층을 감압농축한 후 에탄올로 재결정하여 <중간체 1-a> 58.7 g을 얻었다. (수율 88%)

[391]

[392] 합성예 1-(2): <중간체 1-b>의 합성

[393]



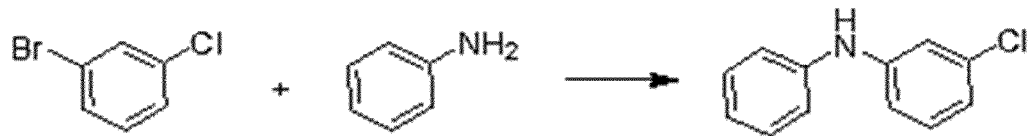
[394] <중간체 1-b>

[395] 반응기에 포타슘하이드록사이드 12.1 g (216 mmol)과 에탄올 200 mL을 넣고 녹인다. 0 °C에서 <중간체 1-a> 34.3 g (108 mmol)을 에탄올에 녹여 적가한 후 2시간동안 환류 교반한다. 반응 종료 후 감압농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 1-b> 12.8 g 얻었다. (수율 50%)

[396]

[397] 합성예 1-3: <중간체 1-c>의 합성

[398]



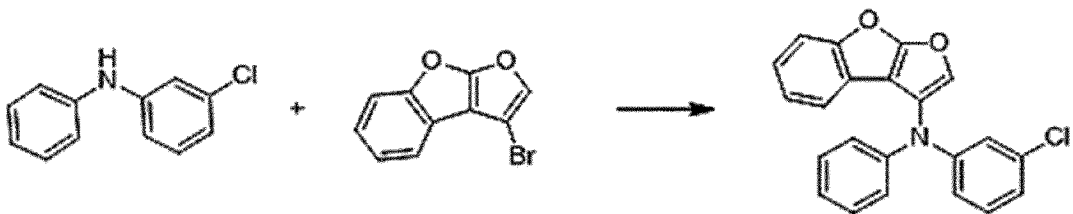
[399] <중간체 1-c>

[400] 반응기에 1-브로모-3-클로로벤젠 3.1 g (16 mmol), 아닐린 5.8 g (16 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.1 g (1 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 3 g (32 mmol), 비스(디페닐포스피노)-1,1'-바이나프틸 0.2 g (1 mmol), 톨루엔 45 mL를 넣고 24 시간동안 환류 교반한다. 반응종료 후 여과하여 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 1-c> 5.2 g을 얻었다. (수율82%)

[401]

[402] 합성예 1-4: <중간체 1-d>의 합성

[403]



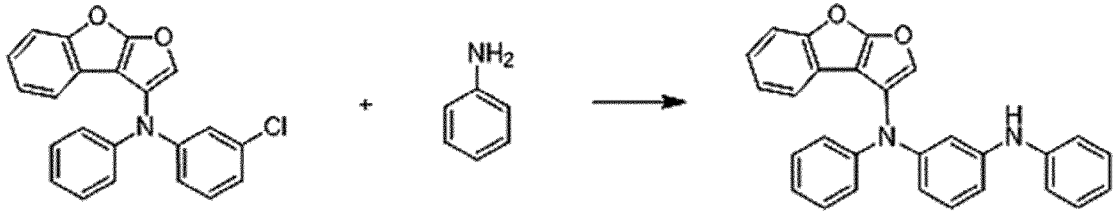
[404] <중간체 1-d>

[405] 반응기에 <중간체 1-c> 20 g (98 mmol), <중간체 1-b> 23.2 g (98 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.5 g (2 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 18.9 g (196 mmol), 트리터셔리부틸포스핀 0.8 g (4 mmol), 톨루엔 200 mL를 넣고 5시간동안 환류 교반한다. 반응종료 후 여과하여 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 1-d> 27.5 g을 얻었다. (수율 78%)

[406]

[407] 합성예 1-5: <중간체 1-e>의 합성

[408]



[409]

<중간체 1-e>

[410]

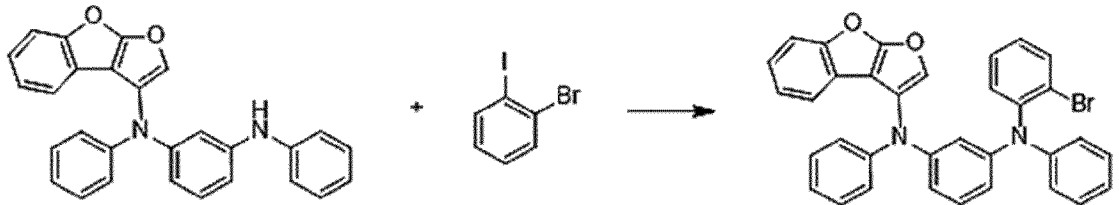
합성예 1-3에서 1-브로모-3-클로로벤젠 대신 <중간체 1-d>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 1-e>을 얻었다. (수율 71%)

[411]

[412]

합성예 1-6. <중간체 1-f>의 합성

[413]



[414]

<중간체 1-f>

[415]

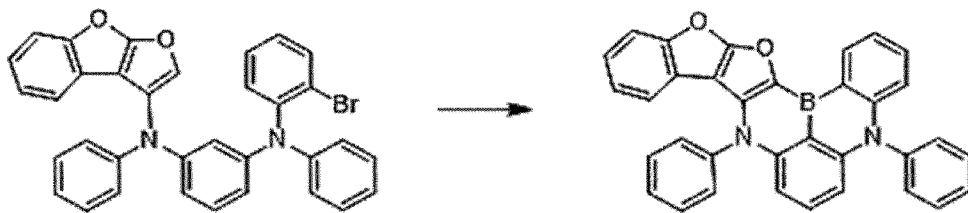
합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 1-e>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 1-브로모-2-아이오도벤젠을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 1-f>를 얻었다. (수율 80%)

[416]

[417]

합성예 1-7. <화학식 31>의 합성

[418]



[419]

<화학식 31>

[420]

반응기에 <중간체 1-f> 13.1 g (23 mmol), 터셔리부틸벤젠 120 mL을 넣는다. -78 °C에서 n-부틸리튬 42.5 mL (68 mmol)를 적가한 후 60 °C에서 3시간 교반한다. 같은 온도에서 질소를 불어 헵탄을 제거한다. 온도를 -78 °C로 낮춘 후 보론트리브로마이드 11.3 g (45 mmol)을 적가한다. 상온에서 1시간 교반한다. 0 °C에서 N,N-다이소프로필에틸아민 5.9 g (45 mmol)을 적가한 후 120 °C에서 2시간 교반한다. 상온에서 소듐아세테이트 수용액을 넣고 교반한다. 반응종료 후 여과하여 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <화학식 31> 1.4 g을 얻었다. (수율 12%)

[421]

MS (MALDI-TOF) : m/z 500.17 [M⁺]

[422]

[423]

합성예 2: 화학식 4의 합성

[424] 합성예 2-(1): <중간체 2-a>의 합성

[425]



[426] <중간체 2-a>

[427] 반응기에 티에노[2,3-b]벤조티오펜 19 g (100 mmol), 클로로포름 300 mL를 넣고 교반한다. 0 °C로 냉각한 후, N-브로모숙신이미드 17.8 mg (100 mmol)을 30분 동안 천천히 적가한 후 4시간 교반한다. 반응종료 후 추출하여 농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 2-a> 22.6 g을 얻었다. (수율 84%)

[428]

[429] 합성예 2-(2): <화학식 4>의 합성

[430] 합성예 1-4에서 <중간체 1-b> 대신 <중간체 2-a>를 사용한 것을 제외하고는 합성예 1-4 내지 1-7과 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 4>를 얻었다. (수율 12%)

[431]

[432] 합성예 3: 화학식 23의 합성

[433] 합성예 3-(1): <중간체 3-a>의 합성

[434]



[435] <중간체 3-a>

[436] 반응기에 벤조티에노퓨란-3(2h)-온 5 g (26.2 mmol)을 넣고 메탄올 50ml에 녹인다. 온도를 0 °C로 냉각한 후, 소듐보로하이드라이드 1.5 g (40 mmol)을 천천히 15분 동안 적가한 후 1 시간 교반한다. 얼음물 100 ml를 넣고 희석한 후 5% 염산으로 산성화시켜 pH 4로 맞춘다. 추출하여 농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 3-a> 3.5 g을 얻었다. (수율 76%)

[437]

[438] 합성예 3-(2): <중간체 3-b>의 합성

[439]



[440] <중간체 3-b>

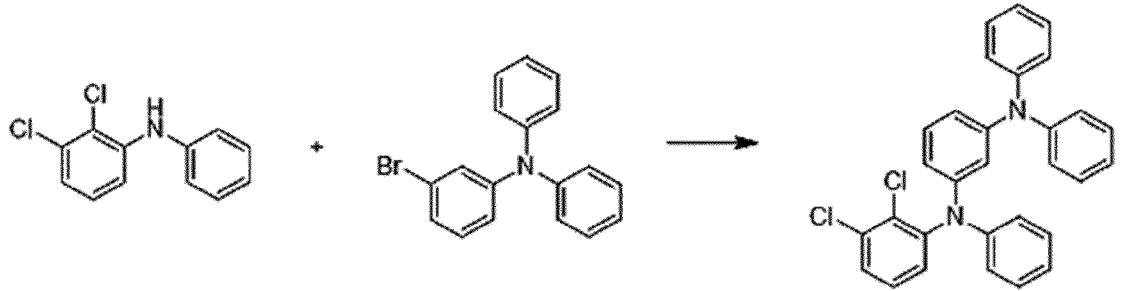
[441] 다이옥산-다이클로로메탄 1:1 혼합용액 10 ml에 다이브로마이드 1.57 g (6.33 mmol)를 녹인 후 같은용매(다이옥산-다이클로로메탄 1:1 혼합용액) 6ml에 <중간체 3-a> 1 g (5.74 mmol)을 녹인 용액을 0 °C에서 천천히 적가하였다. 같은 온도에서 2 시간 교반하였다. 소듐 하이드로젠 카보네이트를 넣어 중성화시키고 20분 후 여과한다. 추출하여 농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여

<중간체 3-b> 0.84 g을 얻었다. (수율 58%)

[442]

[443] 합성예 3-(3): <중간체 3-c>의 합성

[444]



[445]

<중간체 3-c>

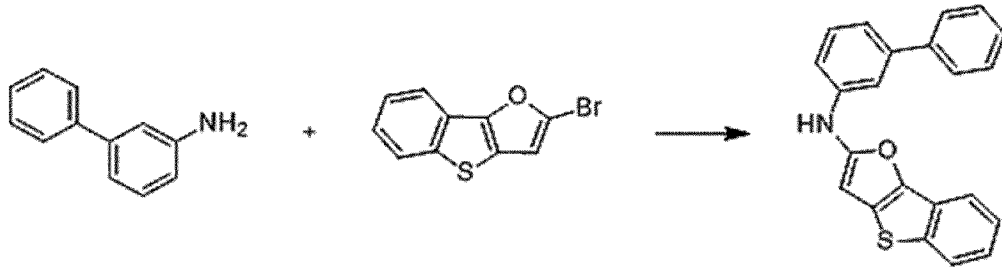
[446]

합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 2,3-디클로로-N-페닐아닐린을 사용하고, <중간체 1-b> 대신 3-브로모-트리페닐아민을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-c>를 얻었다. (수율 77%)

[447]

[448] 합성예 3-(4): <중간체 3-d>의 합성

[449]



[450]

<중간체 3-d>

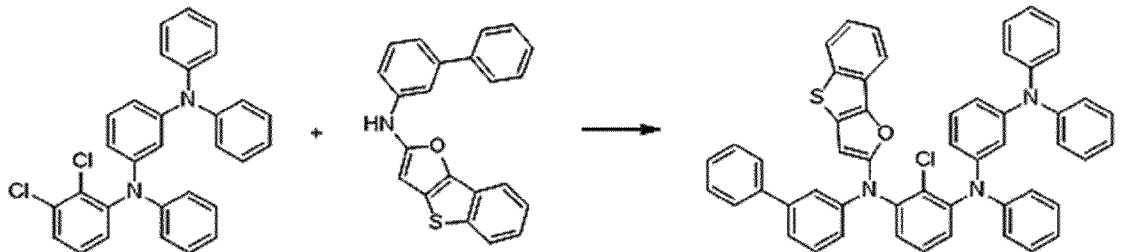
[451]

합성예 1-3에서 1-브로모-3-클로로벤젠 대신 <중간체 3-b>를 사용하고, 아닐린 대신 3-아미노바이페닐을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-d>를 얻었다. (수율 67%)

[452]

[453] 합성예 3-(5): <중간체 3-e>의 합성

[454]



[455]

<중간체 3-e>

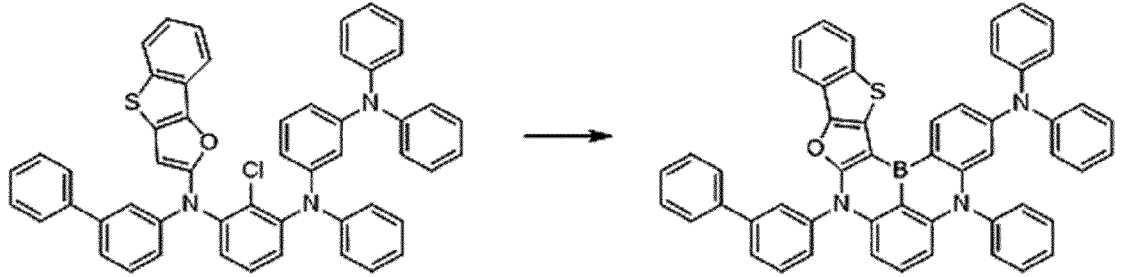
[456]

합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 3-d>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 <중간체 3-c>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-e>를 얻었다. (수율 60%)

[457]

[458] 합성예 3-(6): <화학식 23>의 합성

[459]



[460] <화학식 23>

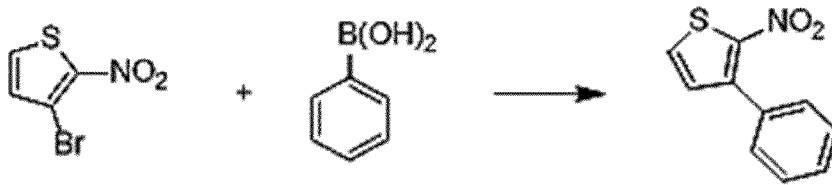
[461] 합성예 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 3-e>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 23>을 얻었다. (수율 17%)

[462] MS (MALDI-TOF) : m/z 759.25 [M⁺]

[463]

[464] 합성예 4: 화학식 8의 합성[465] 합성예 4-(1): <중간체 4-a>의 합성

[466]



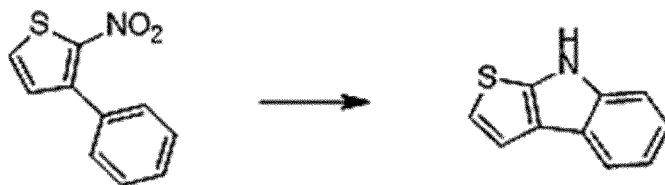
[467] <중간체 4-a>

[468] 반응기에 3-브로모-2나이트로티오펜 20.8 g (100 mmol), 페닐브론산 12.2 g (100 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 4 g (3 mmol), 탄산칼륨 41.5 g (300 mmol), 테트라하이드로퓨란 250 mL, 증류수 90mL를 넣고 24 시간 동안 환류교반한다. 반응종료 후 유기층을 감압농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 4-a> 16 g을 얻었다. (수율 78%)

[469]

[470] 합성예 4-(2): <중간체 4-b>의 합성

[471]



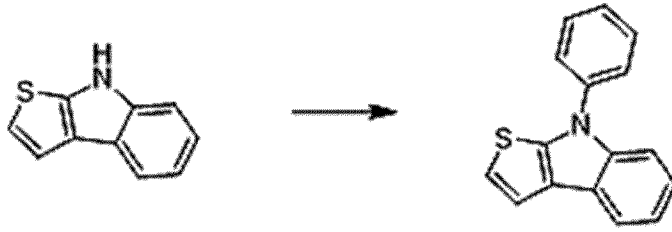
[472] <중간체 4-b>

[473] 반응기에 <중간체 4-a> 16 g (78 mmol), 트리페닐포스핀 51.1 g (195 mmol)을 넣은 후 1,2-디클로로벤젠 300 ml을 넣고 녹인 후 24시간 동안 환류교반한다. 반응종료 후 유기층을 감압농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 4-b> 9.7 g을 얻었다. (수율 72%)

[474]

[475] 합성예 4-(3): <중간체 4-c>의 합성

[476]



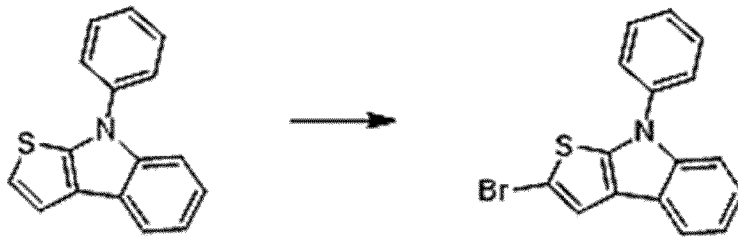
[477] <중간체 4-c>

[478] 합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 4-b>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 아이오도벤젠을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-c>를 얻었다. (수율 74%)

[479]

[480] 합성예 4-(4): <중간체 4-d>의 합성

[481]



[482] <중간체 4-d>

[483] 합성예 2-1에서 티에노[2,3-b]벤조티오펜 대신 <중간체 4-c>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-d>를 얻었다. (수율 78%)

[484]

[485] 합성예 4-(5): <화학식 8>의 합성

[486] 합성예 1-4에서 <중간체 1-b> 대신 <중간체 4-d>를 사용한 것을 제외하고는 합성예 1-4 내지 1-7과 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 8>을 얻었다. (수율 13%)

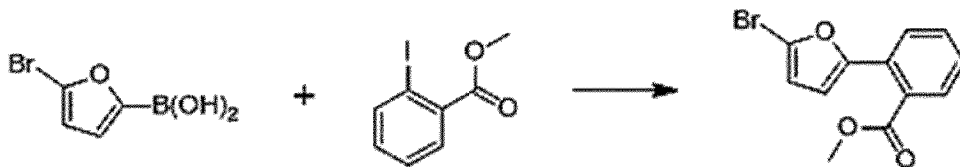
[487] MS (MALDI-TOF) : m/z 591.19 [M⁺]

[488]

[489] **합성예 5: 화학식 13의 합성**

[490] 합성예 5-(1): <중간체 5-a>의 합성

[491]



[492] <중간체 5-a>

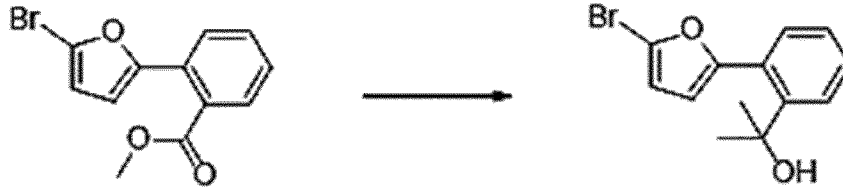
[493] 반응기에 5-브로모푸란-2-보론산 22.5 g (118 mmol), 메틸2-브로모-아이오도벤조에이트 30.9 g (118 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 2.7 g (2.3 mmol), 탄산칼륨 33 g (237 mmol),

톨루엔 200 ml, 1,4-다이옥산 200 ml, 물 100 ml를 질소 상태에서 투입하고 12 시간 동안 환류시켰다. 반응종료 후 유기층을 감압농축한 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 5-a> 24.5 g 를 얻었다. (수율 74%)

[494]

[495] 합성예 5-(2): <중간체 5-b>의 합성

[496]



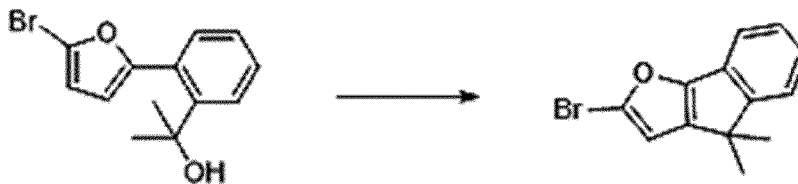
[497] <중간체 5-b>

[498] 테트라하이드로푸란 150 ml가 들어 있는 반응기에 <중간체 5-a> 30.9 g (110 mmol)를 넣고 온도를 -10 °C로 낮춘 후 3 M 메틸마그네슘브로마이드 85 ml (254 mmol)을 천천히 적가한다. 40 °C로 온도를 높인 후 4 시간동안 교반한다. 온도를 -10 °C로 낮춘 후 2 N 염산 70 ml를 천천히 적가한 후 암모늄클로라이드 수용액 70 ml를 넣어 준 후 온도를 상온으로 올려준다. 반응 종결 후 반응물을 물로 씻고, 감압농축한 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 5-b> 24.7 g 를 얻었다. (수율 80%)

[499]

[500] 합성예 5-(3): <중간체 5-c>의 합성

[501]



[502] <중간체 5-c>

[503] 반응기에 질소분위기 하에서 <중간체 5-b> 25 g (89.2 mmol), 인산 70 ml를 넣고 상온에서 12 시간 교반하였다. 반응종료 후 추출하여 농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 5-c> 16.4 g 를 얻었다. (수율 70%)

[504]

[505] 합성예 5-(4): <중간체 5-d>의 합성

[506]



[507] <중간체 5-d>

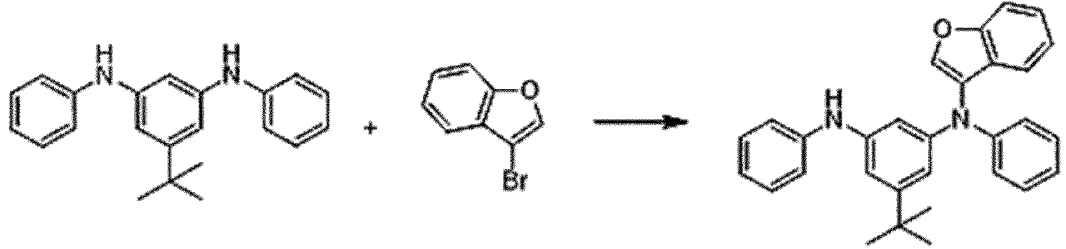
[508] 반응기에 1-브로모-3(터부틸)-5-아이오도벤젠 50 g (177 mmol), 아닐린 36.2 g (389 mmol), 팔라듐아세테이트 1.6 g (7 mmol), 소듐티셔리부톡사이드 51 g (530 mmol), 비스(디페닐포스피노)-1,1'-바이나프틸 4.4 g (7 mmol), 톨루엔 500 mL를

넣고 24 시간동안 환류 교반한다. 반응종료 후 여과하여 여액을 농축한다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 5-d> 42.5 g을 얻었다. (수율 50%)

[509]

[510] 합성예 5-(5): <중간체 5-e>의 합성

[511]



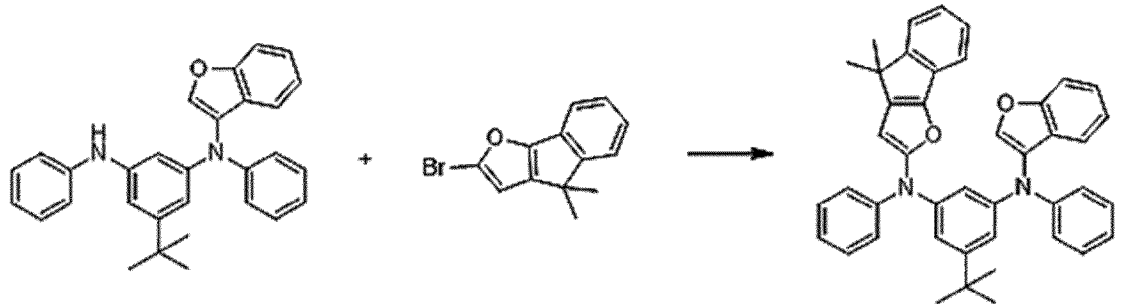
[512] <중간체 5-e>

[513] 반응기에 <중간체 5-d> 31.6 g (100 mmol), 3-브로모벤조퓨란 19.7 g (100 mmol), 팔라듐 아세테이트 1 g (2 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 12.2 g (127 mmol), 트리터셔리부틸포스핀 0.7 g (3mmol), 톨루엔 150 mL를 넣고 5시간 동안 환류교반한다. 반응종료 후 농축한다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 5-e> 19.5 g을 얻었다. (수율 45%)

[514]

[515] 합성예 5-(6): <중간체 5-f>의 합성

[516]



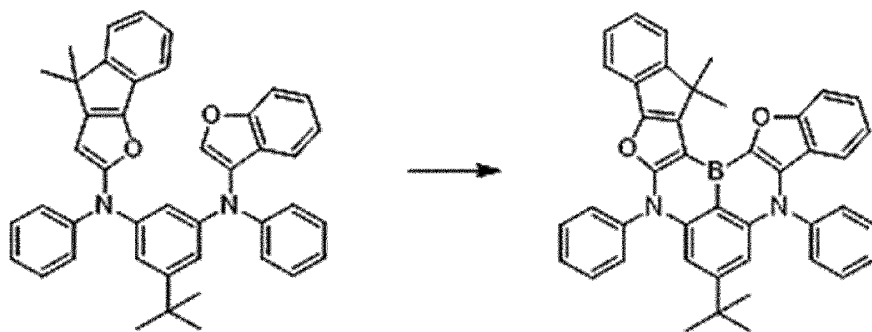
[517] <중간체 5-f>

[518] 합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 5-e>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 <중간체 5-c>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-f>를 얻었다. (수율 67%)

[519]

[520] 합성예 5-(7): <화학식 13>의 합성

[521]



[522] <화학식 13>

[523] 합성에 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 5-f>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 13>을 얻었다. (수율 15%)

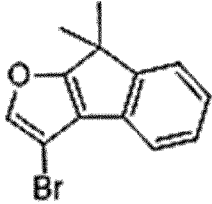
[524] MS (MALDI-TOF) : m/z 622.28 [M⁺]

[525]

[526] **합성예 6: 화학식 60의 합성**

[527] 합성예 6-(1): <중간체 6-a>의 합성

[528]



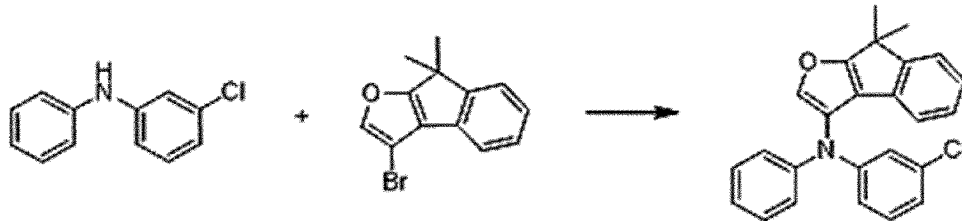
[529] <중간체 6-a>

[530] 합성에 5-1에서 5-브로모퓨란-2-보론산 대신 (4-브로모퓨란-3-일)보론산을 사용한 것을 제외하고는 합성에 5-1 내지 5-3과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-a>를 얻었다. (수율 65%)

[531]

[532] 합성예 6-(2): <중간체 6-b>의 합성

[533]



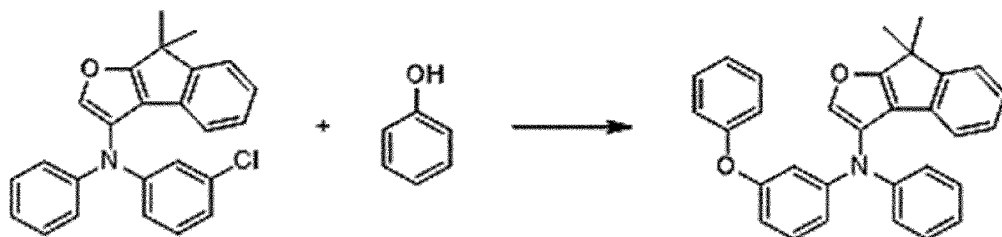
[534] <중간체 6-b>

[535] 합성에 1-4에서 <중간체 1-b> 대신 <중간체 6-a>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-b>를 얻었다. (수율 72%)

[536]

[537] 합성예 6-(3): <중간체 6-c>의 합성

[538]



[539] <중간체 6-c>

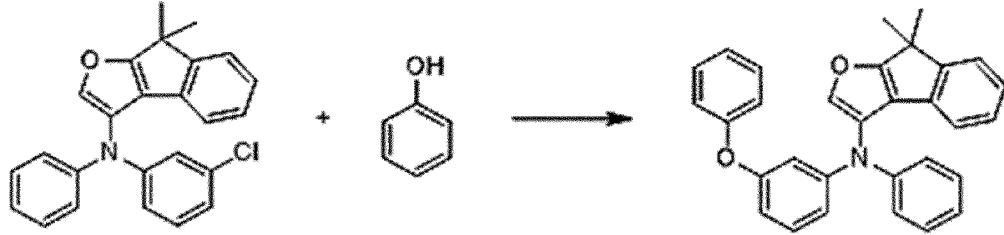
[540] 반응기에 <중간체 6-b> 57.9 g (150 mmol), 페놀 31.2 g (160 mmol), 탄산칼륨 45.7 g (300 mmol) 및 NMP 250 mL을 넣고 160 °C에서 12시간 환류 교반한다. 반응종료 후 온도를 상온으로 낮추고, NMP를 감압하에서 증류제거한 후

추출한다. 용매를 감압농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 6-c> 43.2 g을 얻었다. (수율 65%)

[541]

[542] 합성예 6-(4): <화학식 60>의 합성

[543]



[544] <화학식 60>

[545] 합성예 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 6-c>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 60>을 얻었다. (수율 15%)

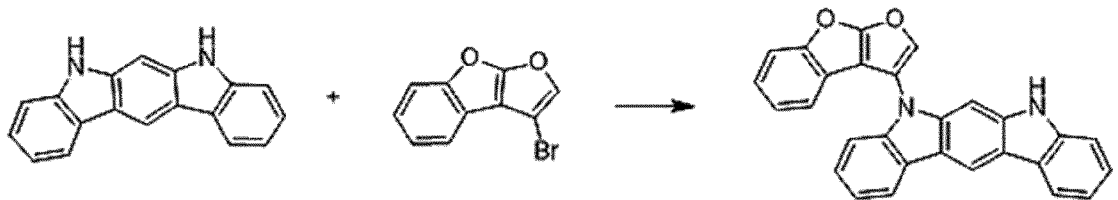
[546] MS (MALDI-TOF) : m/z 451.17 [M⁺]

[547]

[548] 합성예 7: 화학식 84의 합성

[549] 합성예 7-(1): <중간체 7-a>의 합성

[550]



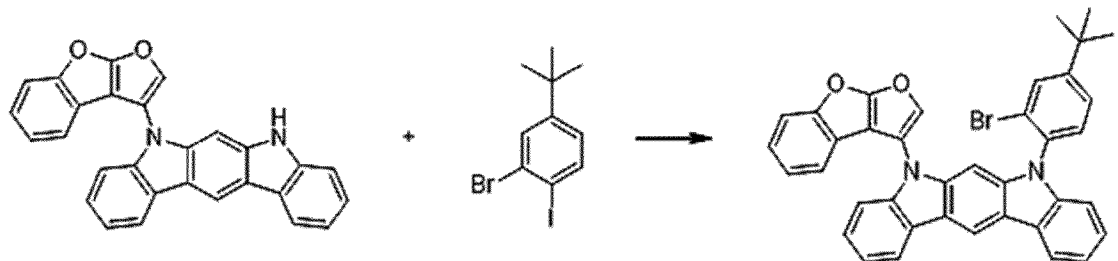
[551] <중간체 7-a>

[552] 반응기에 5,7-디하이드로인돌로[2,3-b]카바졸 10.8 g (42 mmol), <중간체 1-b> 9.9 g (42 mmol), 구리분말 10.7 g (1 mmol), 18-크라운-6-에테르 4.5 g (17 mmol), 탄산칼륨 34.9 g (253 mmol)을 넣고, 디클로로벤젠 110 mL를 가한 후, 180 °C에서 약 24시간 동안 환류교반한다. 반응종료 후 디클로로벤젠을 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 7-a> 12.5 g을 얻었다. (수율 72%)

[553]

[554] 합성예 7-(2): <중간체 7-b>의 합성

[555]



[556] <중간체 7-b>

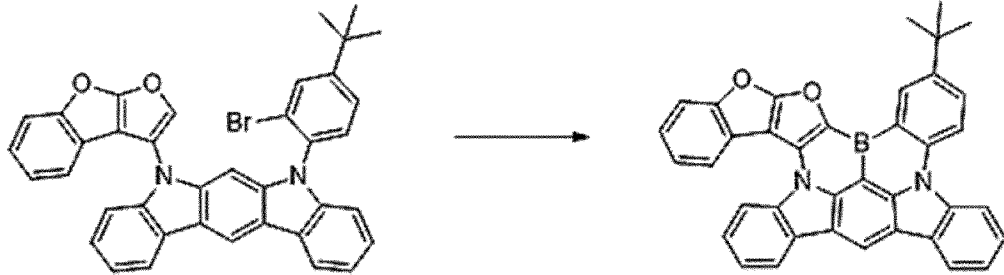
[557] 합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 7-a>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 2-브로모-4-터셔리뷰틸-1-아이오도벤젠을 사용한 것을 제외하고는 동일한

방법으로 합성하여 <중간체 7-b>를 얻었다. (수율 67%)

[558]

[559] 합성예 7-(3): <화학식 84>의 합성

[560]



[561] <화학식 84>

[562] 합성예 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 7-b>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 84>를 얻었다. (수율 15%)

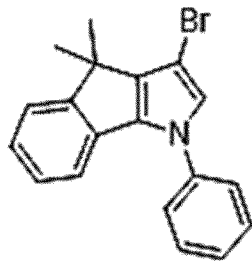
[563] MS (MALDI-TOF) : m/z 552.20 [M⁺]

[564]

[565] **합성예 8: 화학식 46의 합성**

[566] 합성예 8-(1): <중간체 8-a>의 합성

[567]



[568] <중간체 8-a>

[569] 합성예 4-3에서 <중간체 4-b> 대신

4,4-디메틸-1,4-디하이드로인덴노[1,2-b]피롤을 사용한 것을 제외하고는 합성예 4-3 내지 4-4와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 8-a>를 얻었다. (수율 55%)

[570]

[571] 합성예 8-(2): <중간체 8-b>의 합성

[572]



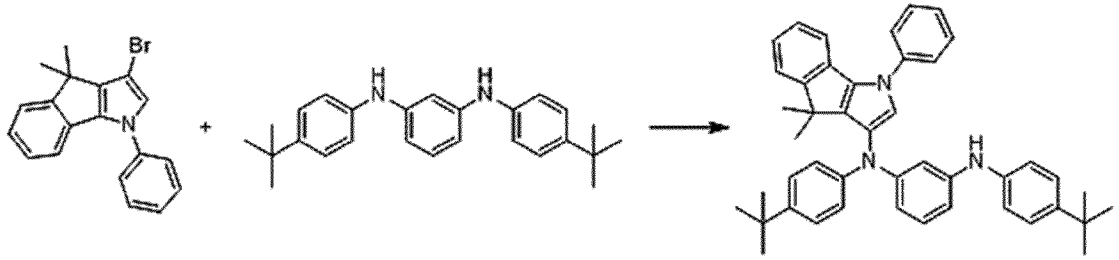
[573] <중간체 8-b>

[574] 합성예 1-3에서 1-브로모-3-클로로벤젠 대신 1,3-디브로모벤젠을 사용하고, 아닐린 대신 4-터셔리부틸아닐린을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 8-b>를 얻었다. (수율 77%)

[575]

[576] 합성예 8-(3): <중간체 8-c>의 합성

[577]



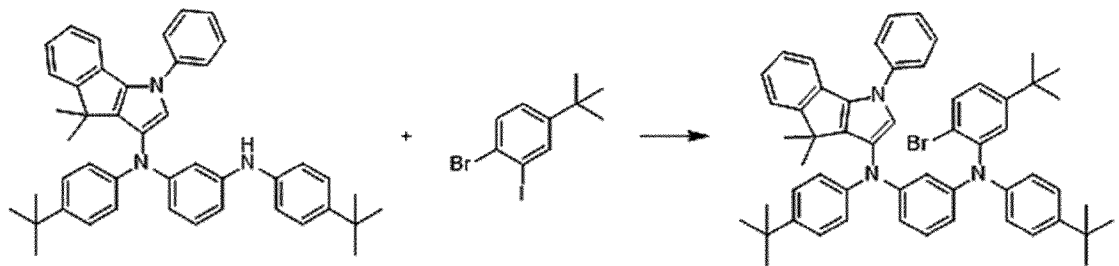
[578] <중간체 8-c>

[579] 합성예 7-1에서 5,7-디하이드로인돌로[2,3-b]카바졸 대신 <중간체 8-b>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 <중간체 8-a>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 8-c>를 얻었다. (수율 69%)

[580]

[581] 합성예 8-(4): <중간체 8-d>의 합성

[582]



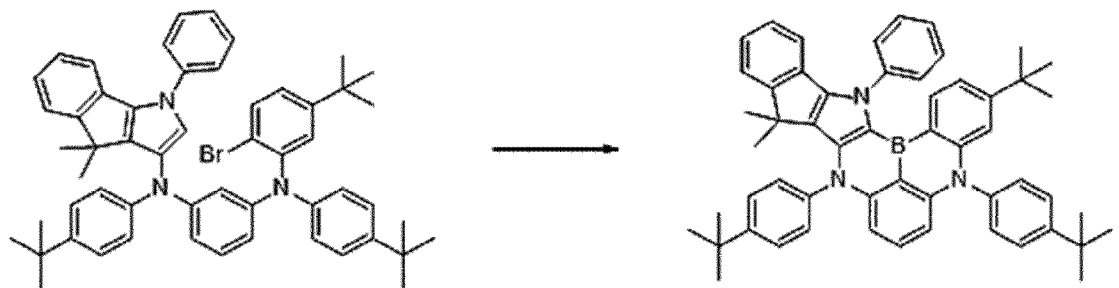
[583] <중간체 8-d>

[584] 합성예 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 8-c>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 1-브로모-4-터셔리뷰틸-2-아이오도벤젠을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 8-d>를 얻었다. (수율 72%)

[585]

[586] 합성예 8-(5): <화학식 46>의 합성

[587]



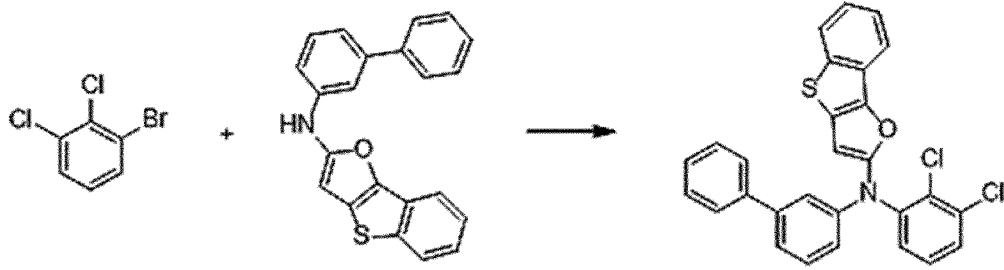
[588] <화학식 46>

[589] 합성예 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 8-d>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 46>을 얻었다. (수율 13%)

[590]

[591] 합성예 9: 화학식 103의 합성[592] 합성예 9-(1): <중간체 9-a>의 합성

[593]



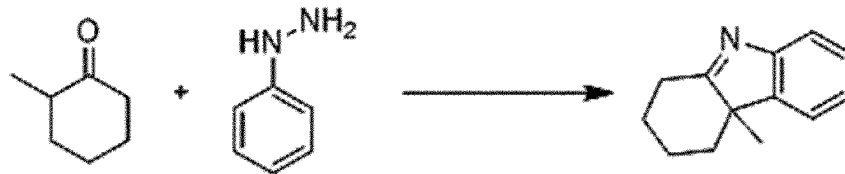
[594] <중간체 9-a>

[595] 합성에 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 3-d>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 1-브로모-2,3-디클로로벤젠을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 9-a>를 얻었다. (수율 75%)

[596]

[597] 합성에 9-(2): <중간체 9-b>의 합성

[598]



[599] <중간체 9-b>

[600] 반응기에 페닐하이드라진 100 g (0.924 mol), 아세트산 500 mL를 교반시킨 후 60 °C로 가열하였다. 2-메틸 싸이클로헥사논 103.6 g (0.924 mol)을 천천히 적가한 후 8 시간동안 환류시켰다. 반응완료 후 물과 에틸아세테이트로 추출한 후 농축하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 9-b> 130 g를 얻었다. (수율 76%)

[601]

[602] 합성에 9-(3): <중간체 9-c>의 합성

[603]



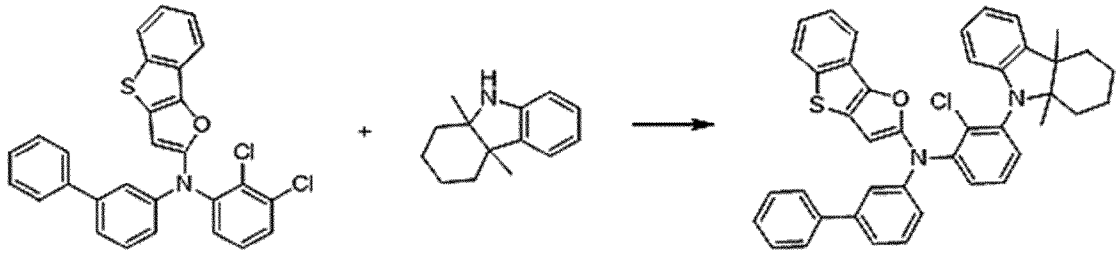
[604] <중간체 9-c>

[605] 질소 분위기 하에 톨루엔 750 mL가 들어있는 반응기에 <중간체 9-b> 75 g (405 mmol)을 넣고 영하 10 °C로 냉각시킨 후 1.6 M 메틸리튬 380 mL (608 mmol)을 천천히 적가하고 영하 10 °C에서 3시간 정도 교반시켰다. 반응 완료 후 물과 에틸아세테이트를 이용하여 추출 후 농축하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 <중간체 9-c> 50.5 g를 얻었다. (수율 62%)

[606]

[607] 합성에 9-(4): <중간체 9-d>의 합성

[608]



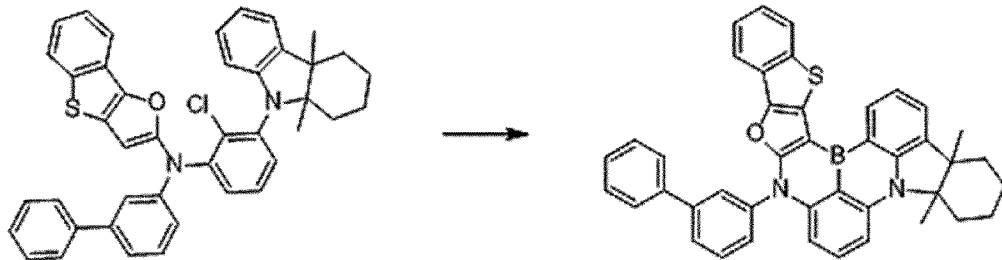
[609] <중간체 9-d>

[610] 합성에 1-4에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 9-c>를 사용하고, <중간체 1-b> 대신 <중간체 9-a>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 9-d>를 얻었다. (수율 64%)

[611]

[612] 합성에 9-(5): <화학식 103>의 합성

[613]



[614] <화학식 103>

[615] 합성에 1-7에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 9-d>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 103>을 얻었다. (수율 15%)

[616] MS (MALDI-TOF) : m/z 624.24 [M⁺]

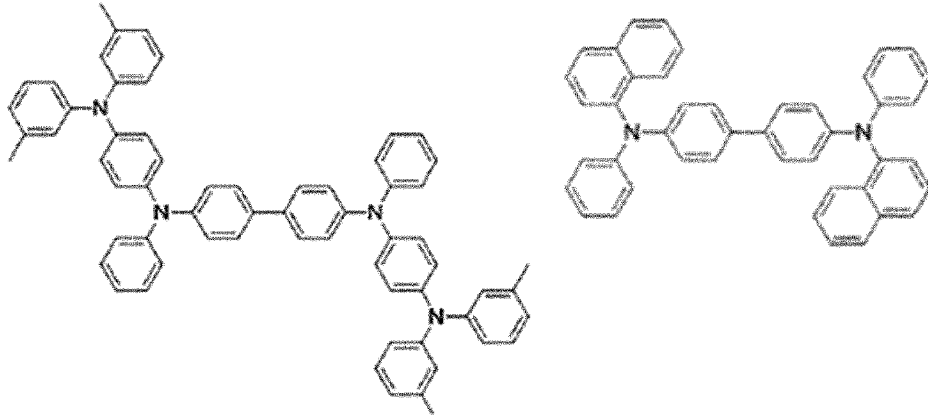
[617]

[618] 실시예 1 ~ 18: 유기발광소자의 제조

[619] ITO 글래스의 발광면적이 2mm*2mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 상기 ITO 글래스를 진공 챔버에 장착한 후 DNTPD (700 Å), α-NPD (300 Å) 순으로 성막하였다. 발광층의 호스트와 도판트로서 하기 표 1에 기재된 화합물을 중량비 (97:3)으로 혼합하여 성막 (250Å)한 다음, 이후에 전자 수송층으로 [화학식 E-1] (300 Å)을, 전자 주입층으로 Liq (10 Å)를 차례로 성막하고, 음극인 Al (1000 Å)을 성막하여 유기발광소자를 제조하였다. 상기 유기발광소자의 특성은 10 mA/cm²에서 측정을 하였다.

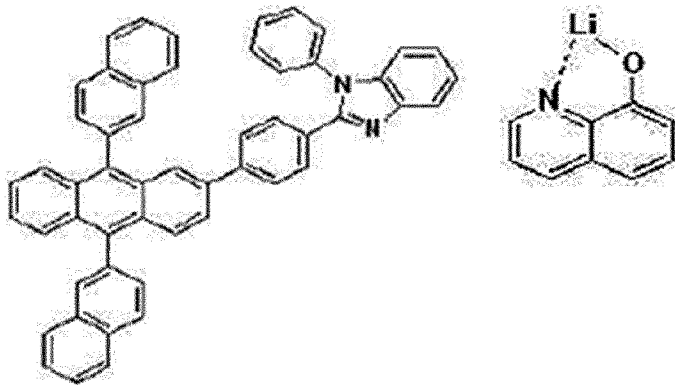
[620] [DNTPD] [α-NPD]

[621]



[622] [화학식E-1] [Liq]

[623]



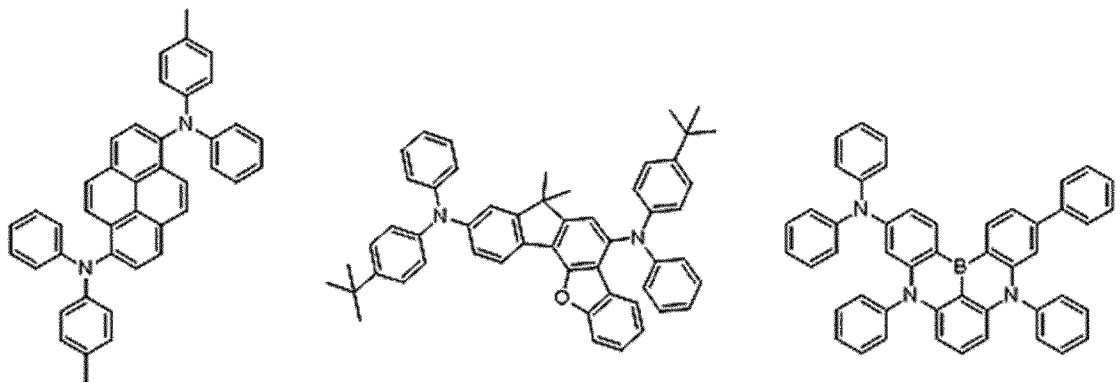
[624]

[625] 비교예 1 내지 6

[626] 상기 실시예 1 내지 18에서 사용된 도판트 화합물 대신 [BD1] 내지 [BD3]을 사용한 것 이외에는 동일하게 유기발광소자를 제작하였으며, 상기 유기발광소자의 발광특성은 10 mA/cm²에서 측정하였다. 상기 [BD1] 내지 [BD3]의 구조는 다음과 같다.

[627] [BD1] [BD2] [BD 3]

[628]



[629]

[630] [표1]

	호스트	도판트	EQE	T97(h)
실시예 1	화합물 129	화학식 4	9.05	127
실시예 2	화합물 244	화학식 4	9.22	136
실시예 3	화합물 129	화학식 8	9.18	145
실시예 4	화합물 244	화학식 8	9.27	139
실시예 5	화합물 129	화학식 13	9.34	154
실시예 6	화합물 244	화학식 13	9.65	161
실시예 7	화합물 129	화학식 23	9.22	169
실시예 8	화합물 244	화학식 23	9.46	133
실시예 9	화합물 129	화학식 31	9.38	145
실시예 10	화합물 244	화학식 31	9.65	158
실시예 11	화합물 129	화학식 60	9.42	144
실시예 12	화합물 244	화학식 60	9.59	173
실시예 13	화합물 129	화학식 84	9.37	166
실시예 14	화합물 244	화학식 84	9.53	173
실시예 15	화합물 129	화학식 46	9.68	159
실시예 16	화합물 244	화학식 46	9.87	175
실시예 17	화합물 129	화학식 103	9.15	130
실시예 18	화합물 244	화학식 103	9.32	141
비교예 1	화합물 129	BD 1	5.68	81
비교예 2	화합물 244	BD 1	5.97	87
비교예 3	화합물 129	BD 2	7.16	88
비교예 4	화합물 244	BD 2	7.25	92
비교예 5	화합물 129	BD 3	7.36	90
비교예 6	화합물 244	BD 3	7.51	94

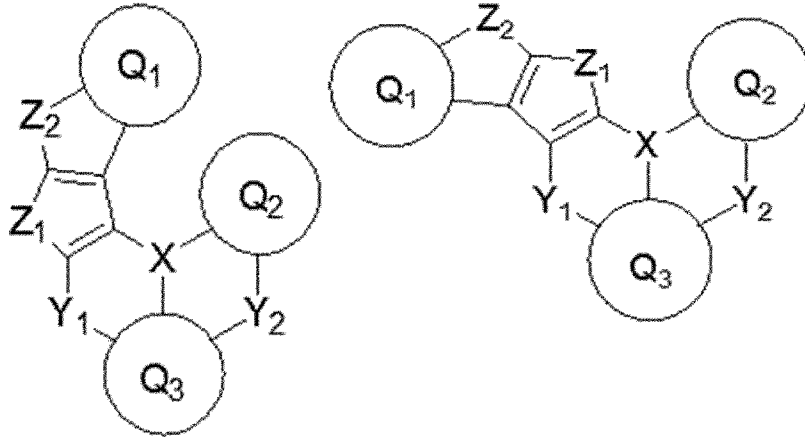
[631] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 본 발명에 의한 유기발광소자는 종래기술에 의한 비교예 1 내지 비교예 6의 화합물을 사용한 유기발광소자보다 발광 효율이 우수하며, 장수명의 소자특성을 보여줌으로써 유기발광 소자로서 응용가능성이 높은 것을 알 수 있다.

산업상 이용가능성

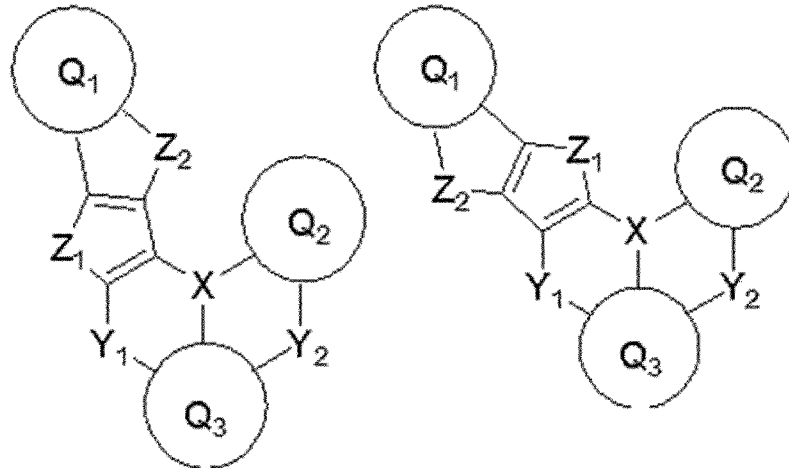
- [632] 본 발명에 따른 신규한 보론 화합물은 유기발광소자내 도판트 물질로 이용하는 경우에, 기존 물질에 비하여 보다 장수명 및 고효율의 특성을 가지고 있어, 유기발광소자에 적용하는 경우에 개선된 특성을 나타내어 유기발광소자 및 이와 관련한 산업 분야에서 산업상 이용가능성이 높다.

청구범위

[청구항 1] 하기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중 어느 하나로 표시되는 보론 화합물.
[화학식 A] [화학식 B]



[화학식 C] [화학식 D]



상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서,
상기 Q1 내지 Q3은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리이고,
상기 X는 B, P, P=O 중에서 선택되는 어느 하나이고,
상기 Y1 및 Y2는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N-R₁, CR₂R₃, O, S 및 SiR₄R₅ 중에서 선택되는 어느 하나이며,
상기 Z1 및 Z2는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 N-R₆, CR₇R₈, O, S 및 SiR₉R₁₀ 중에서 선택되는 어느 하나이고,
상기 치환기 R₁ 내지 R₁₀은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기,

치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 니트로기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,

상기 R_2 및 R_3 , R_4 및 R_5 , R_7 및 R_8 , R_9 및 R_{10} 은 각각 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있으며, 상기 Y_1 내 치환기 R_1 내지 R_5 는 상기 Q_3 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고, 상기 Y_2 내 치환기 R_1 내지 R_5 는 상기 Q_2 고리 또는 Q_3 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

상기 연결기 Z_2 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 상기 Q_1 고리와 결합하여 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

상기 [화학식 A]에서,

상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Z_2 또는 Y_1 과 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

상기 [화학식 B]에서,

상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Z_2 와 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

상기 [화학식 C]에서,

상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Y_1 과 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

상기 [화학식 D]에서,

상기 Z_1 내 치환기 R_6 내지 R_{10} 은 각각 Q_1 과 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있고,

여기서, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 상기 '치환 또는

비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기,

니트로기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된

알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기,

탄소수 3 내지 24의 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기,

탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 7 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 7

내지 24의 알킬아릴기, 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 탄소수 2 내지

24의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 탄소수 1 내지

24의 알킬아미노기, 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 탄소수 2 내지

24의 디헤테로 아릴아미노기, 탄소수 7 내지 24의

아릴(헤테로아릴)아미노기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 6 내지 24의 아릴티오닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

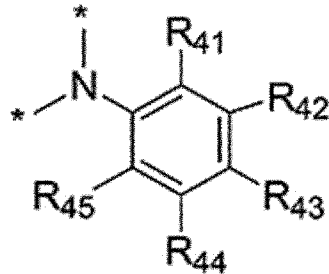
[청구항 2] 제 1 항에 있어서,
상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 $N-R_1$ 인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

여기서, 상기 R_1 은 청구항 1에서 정의된 바와 동일하다.

[청구항 3] 제 2항에 있어서,
상기 치환기 R_1 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[청구항 4] 제 2 항에 있어서,
상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 중에서 적어도 하나는 서로 동일하거나, 상이하며 각각 하기 [구조식 A]로 표시되는 연결기인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[구조식 A]



상기 [구조식 A]에서 "*"는 상기 치환기 Z_1 에 연결된 탄소원자 또는 Z_1 을 포함하는 오각고리내 Y_1 에 연결된 탄소원자, Q_2 고리에서의 방향족 탄소원자, 또는 Q_3 고리에서의 방향족 탄소원자와 각각 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

상기 [구조식 A]에서 상기 R_{41} 내지 R_{45} 는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 니트로기, 시아노기, 할로젠기 중에서

선택되는 어느 하나이며, 상기 R_{41} 및 R_{45} 는 각각 상기 Q_2 고리 또는 Q_3 고리와 결합하여 지환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있다.

[청구항 5]

제2항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 는 각각 동일하거나 상이하며, N- R_1 인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

여기서, 상기 R_1 은 청구항 1에서 정의된 바와 동일하다.

[청구항 6]

제 1 항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 연결기 Y_1 및 Y_2 중에서 적어도 하나는 산소(O) 원자인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[청구항 7]

제 1 항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 X는 붕소(B) 원자인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[청구항 8]

제1항에 있어서,

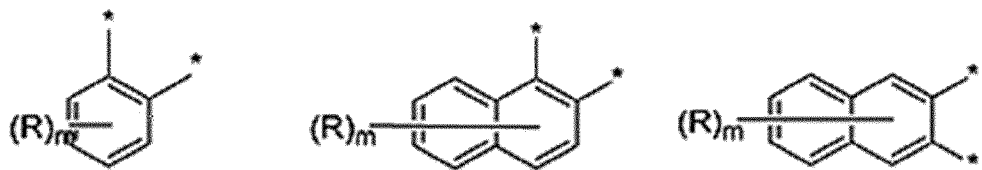
상기 Q_1 내지 Q_3 의 방향족 탄화수소 고리는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[청구항 9]

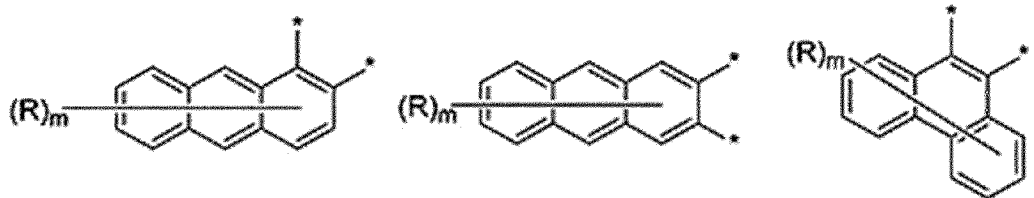
제 8 항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 Q_1 및 Q_2 의 방향족 탄화수소 고리는 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 하기 [구조식 10] 내지 [구조식 21] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

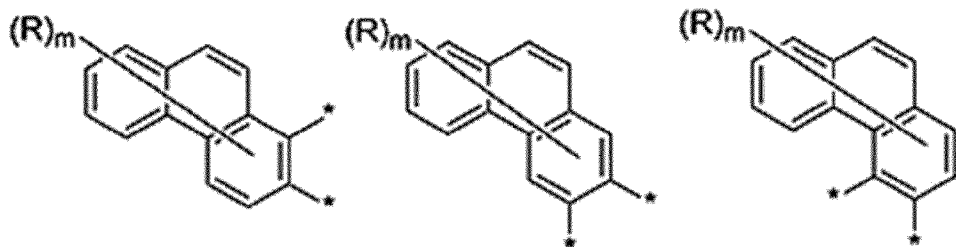
[구조식 10] [구조식 11] [구조식 12]



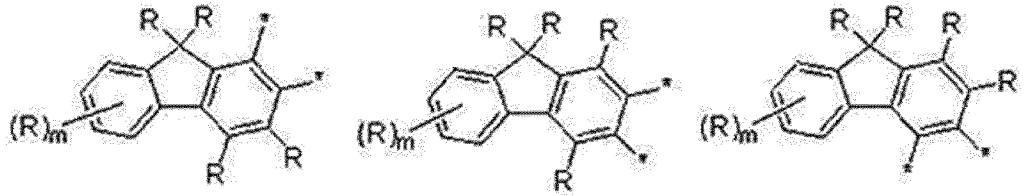
[구조식 13] [구조식 14] [구조식 15]



[구조식 16] [구조식 17] [구조식 18]



[구조식 19] [구조식 20] [구조식 21]



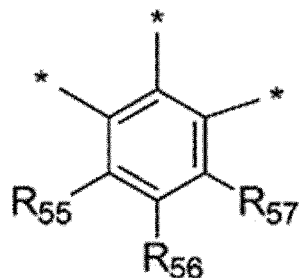
상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 "-*"는 상기 Q₁ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 치환기 Z₂ 또는 치환기 Z₂를 포함하는 오각고리내 탄소원자와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하거나, 또는 상기 Q₂ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 X 또는 연결기 Y₂와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 상기 R은 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 2 내지 24의 디헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며, 상기 m은 1 내지 8의 정수이며, m이 2이상인 경우 또는 R이 2이상인 경우에는 각각의 R은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 10] 제8항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]내 Q₃의 방향족 탄화수소 고리는 하기 [구조식 B]로 표시되는 고리인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[구조식 B]



상기 [구조식 B]에서 "-*"는 Q₃ 고리에서의 방향족 고리내 탄소가 연결기

Y_1 , X 및 연결기 Y_2 와 각각 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며, 상기 [구조식 B]에서 상기 R_{55} 내지 R_{57} 은 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 12 내지 24의 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 2 내지 24의 디헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 탄소수 7 내지 24의 아릴(헤테로아릴)아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 시아노기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이며,

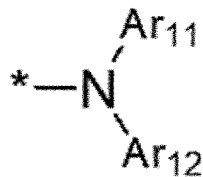
상기 R_{55} 내지 R_{57} 는 각각 서로 이웃한 치환기와 서로 연결되어 치환족 또는 방향족의 단일환 또는 다환고리를 추가적으로 형성할 수 있다.

[청구항 11]

제1항에 있어서,

상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D]에서의 상기 Q1 내지 Q3 중 적어도 하나는 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 탄소수 2 내지 50의 방향족 헤테로고리내에 하기 구조식 F로 표시되는 아릴 아미노기가 결합된 것을 특징으로 하는 보론 화합물.

[구조식 F]



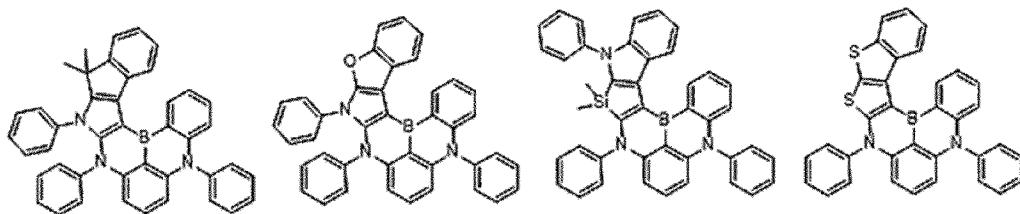
상기 [구조식 F]에서, "*"는 Q₁ 내지 Q₃ 중 어느 하나 이상의 고리의 방향족 탄소와 결합하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 18의 아릴기이고, 이들은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

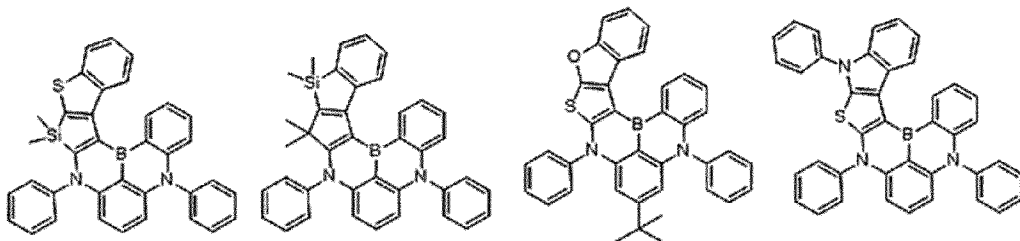
[청구항 12]

제1항에 있어서,

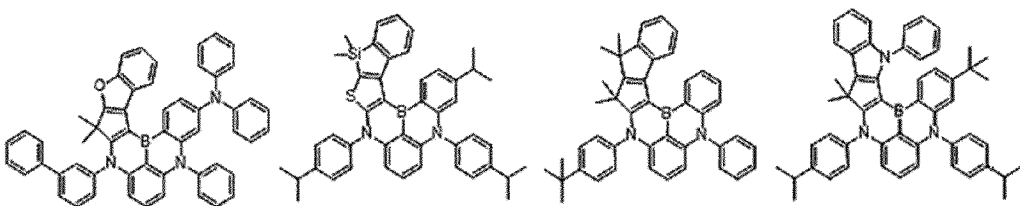
상기 보론 화합물은 하기 <화학식 1> 내지 <화학식 112> 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 보론 화합물.



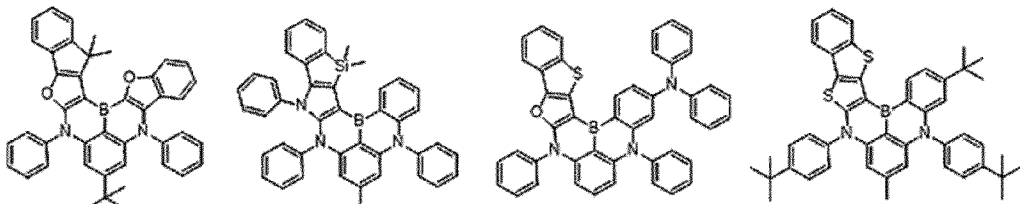
[화학식1] [화학식2] [화학식3] [화학식4]



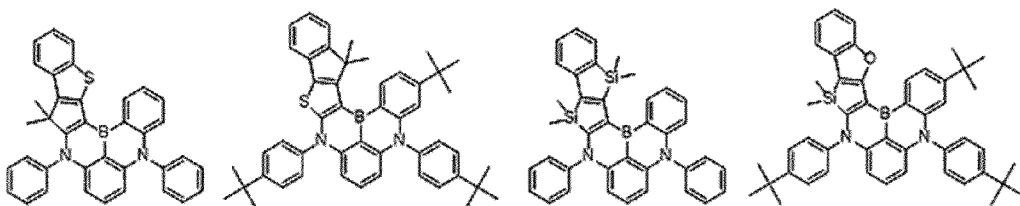
[화학식5] [화학식6] [화학식7] [화학식8]



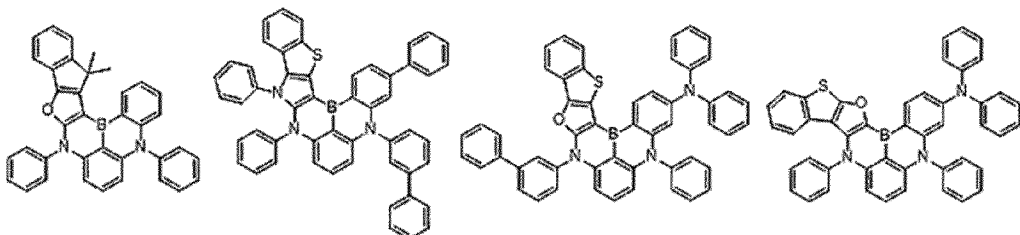
[화학식9] [화학식10] [화학식11] [화학식12]



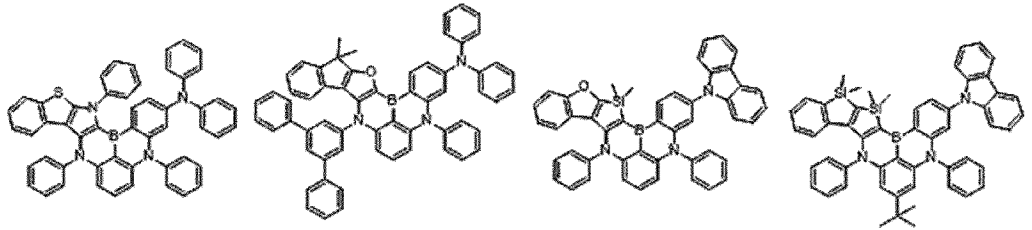
[화학식13] [화학식14] [화학식15] [화학식16]



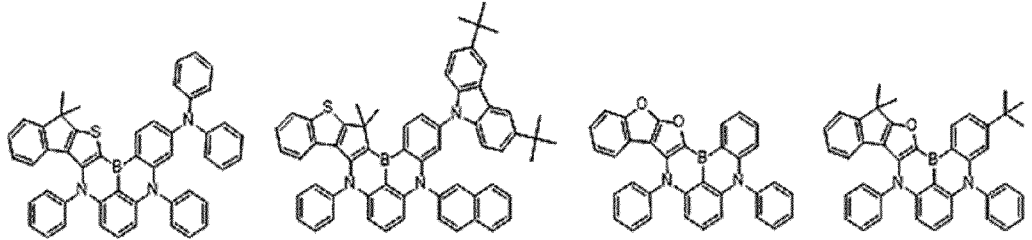
[화학식17] [화학식18] [화학식19] [화학식20]



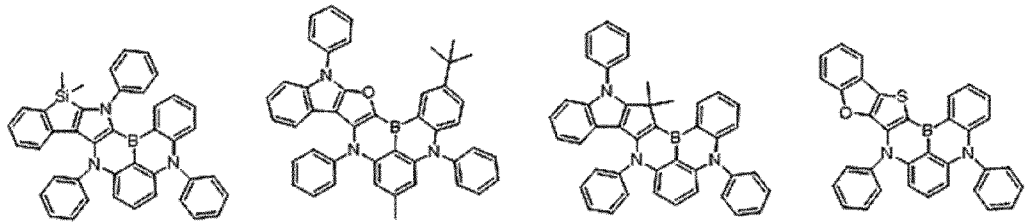
[화학식21] [화학식22] [화학식23] [화학식24]



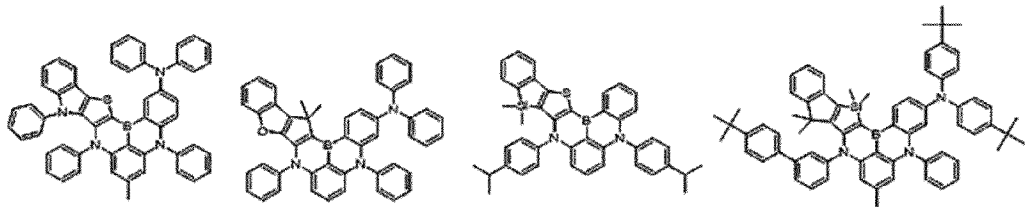
[화학식25] [화학식26] [화학식27] [화학식28]



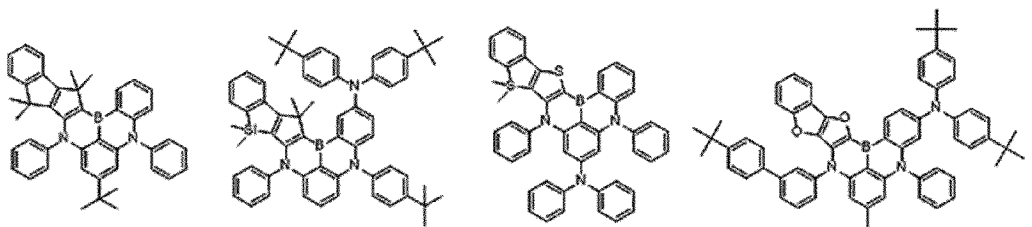
[화학식29] [화학식30] [화학식31] [화학식32]



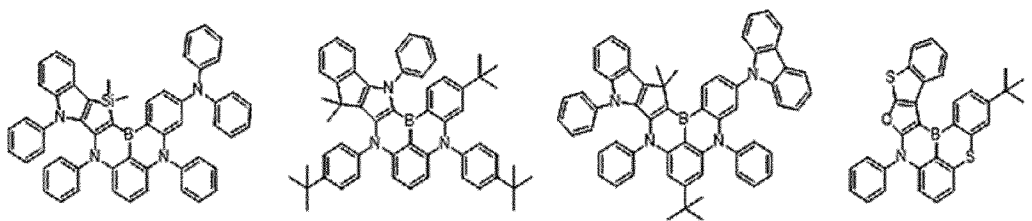
[화학식33] [화학식34] [화학식35] [화학식36]



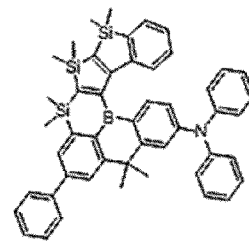
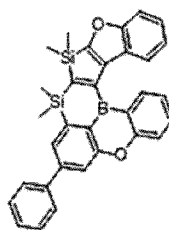
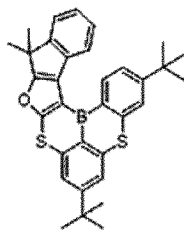
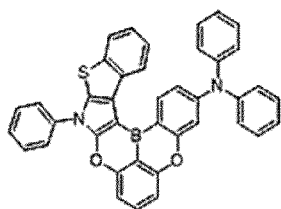
[화학식37] [화학식38] [화학식39] [화학식40]



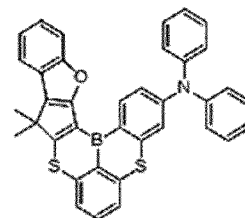
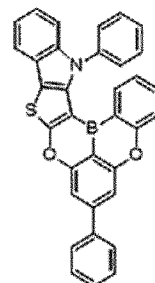
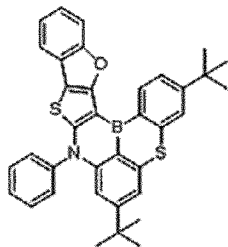
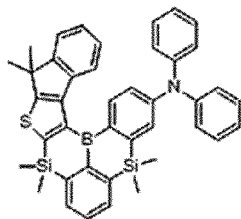
[화학식41] [화학식42] [화학식43] [화학식44]



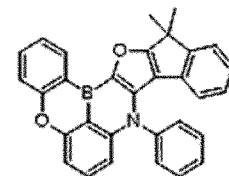
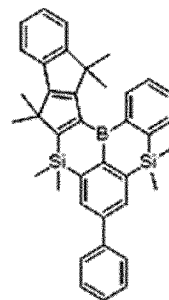
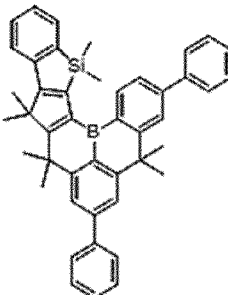
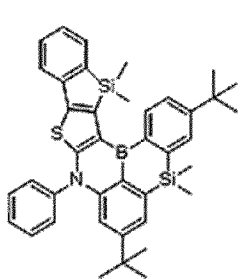
[화학식45] [화학식46] [화학식47] [화학식48]



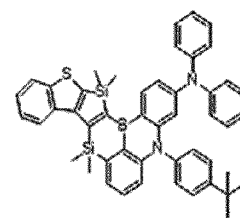
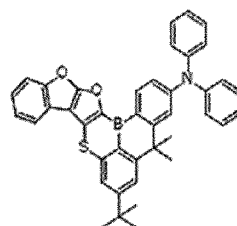
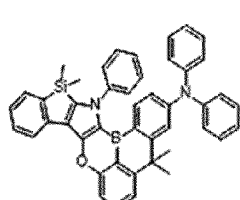
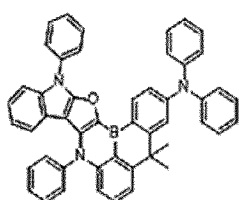
[화학식49] [화학식50] [화학식51] [화학식52]



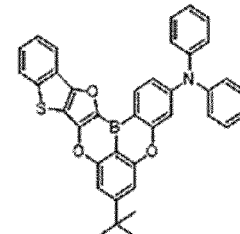
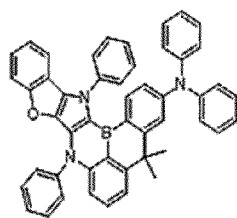
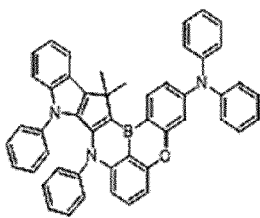
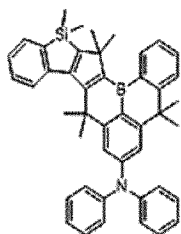
[화학식53] [화학식54] [화학식55] [화학식56]



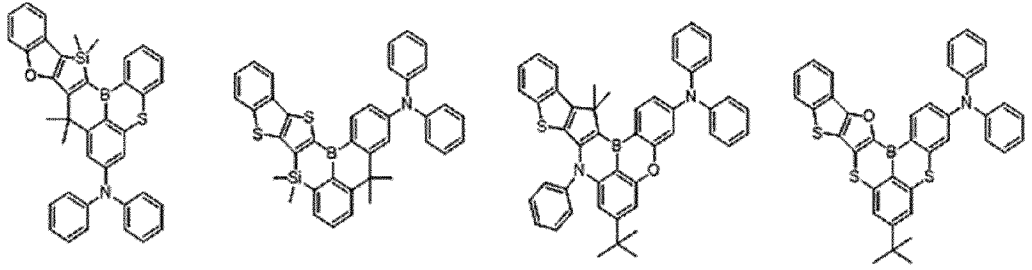
[화학식57] [화학식58] [화학식59] [화학식60]



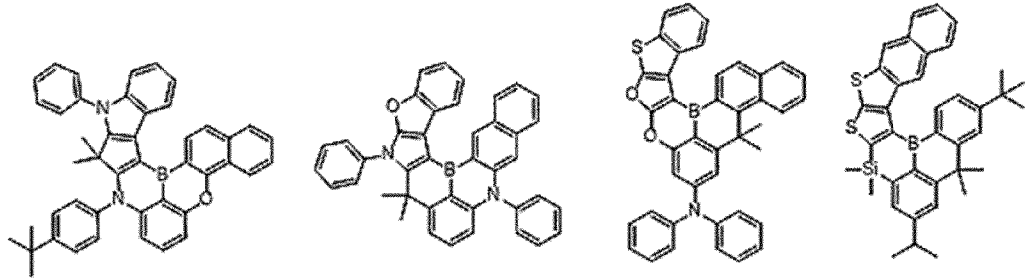
[화학식61] [화학식62] [화학식63] [화학식64]



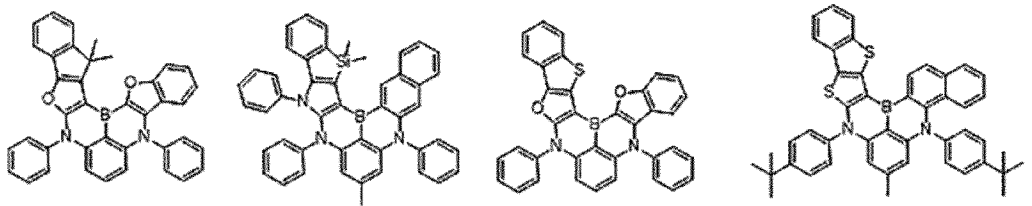
[화학식65] [화학식66] [화학식67] [화학식68]



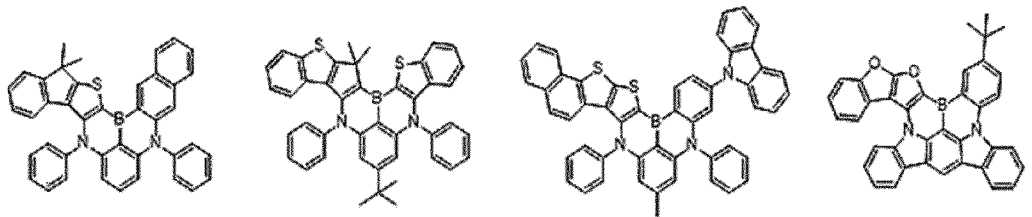
[화학식69] [화학식70] [화학식71] [화학식72]



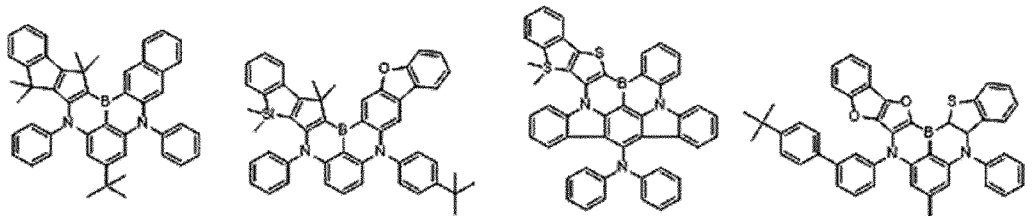
[화학식73] [화학식74] [화학식75] [화학식76]



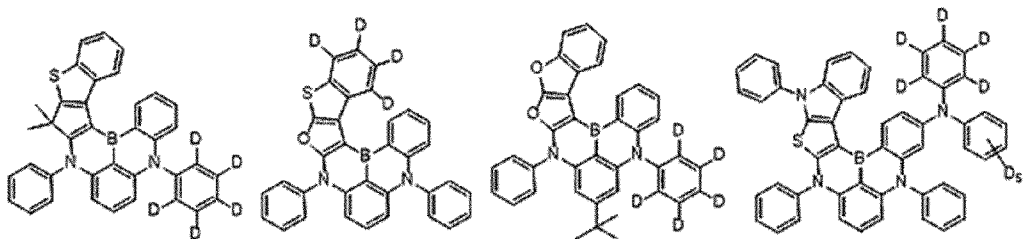
[화학식77] [화학식78] [화학식79] [화학식80]



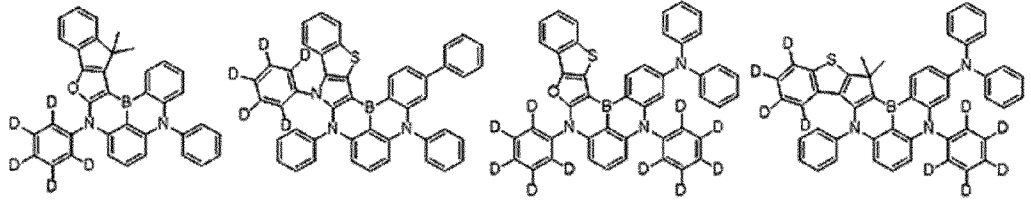
[화학식81] [화학식82] [화학식83] [화학식84]



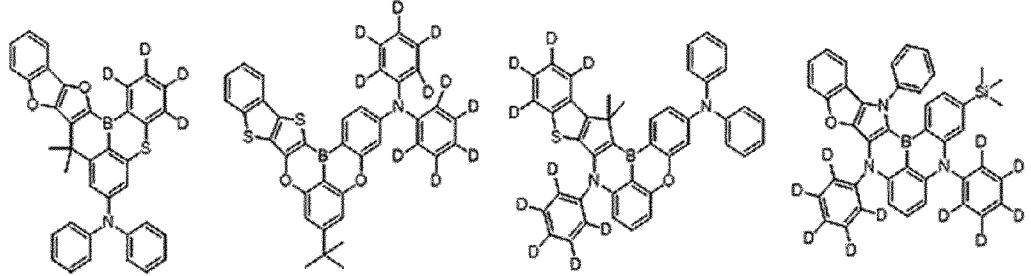
[화학식85] [화학식86] [화학식87] [화학식88]



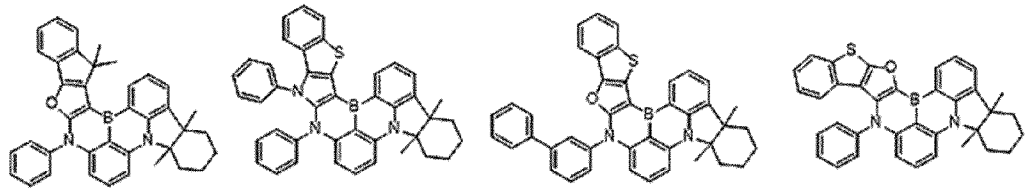
[화학식89] [화학식90] [화학식91] [화학식92]



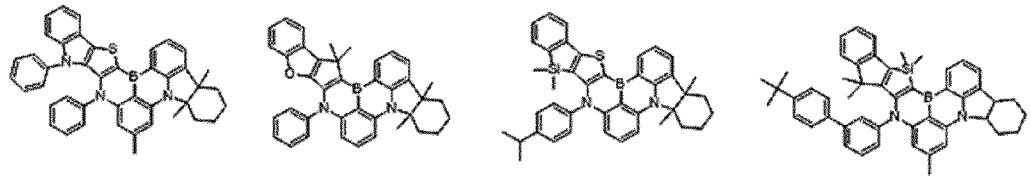
[화학식93] [화학식94] [화학식95] [화학식96]



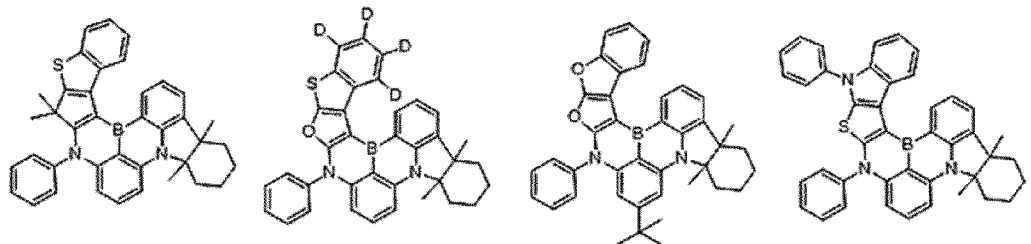
[화학식97] [화학식98] [화학식99] [화학식100]



[화학식101] [화학식102] [화학식103] [화학식104]



[화학식105] [화학식106] [화학식107] [화학식108]



[화학식109] [화학식110] [화학식111] [화학식112]

[청구항 13]

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극사이에 개재되는 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제12항 중에서 선택되는 어느 한 항의 보론 화합물을 1종이상 포함하는 유기발광소자.

[청구항 14]

제13항에 있어서,

상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자주입층 중

적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 15]

제13항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함하며,

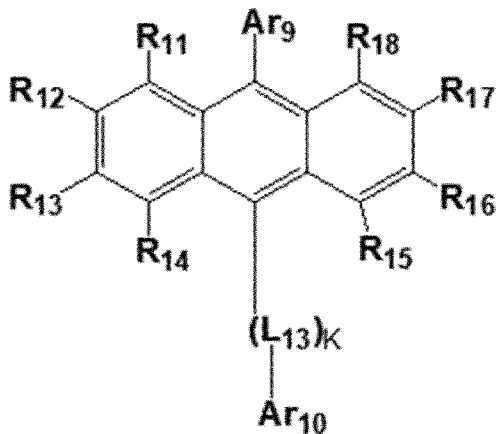
상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 상기 [화학식 A] 내지 [화학식 D] 중에서 어느 하나로 표시되는 보론 화합물이 도판트로서 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 발광소자.

[청구항 16]

제15항에 있어서,

상기 발광층은 하기 [화학식 H]로 표시되는 안트라센 유도체를 호스트로서 사용하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[화학식 H]



상기 [화학식 H]에서

상기 치환기 R₁₁ 내지 R₁₈은 동일하거나 상이하며, 각각 상기 제1항에서의 R₁ 내지 R₁₀에서 정의된 바와 동일하며;

상기 치환기 Ar₉ 및 Ar₁₀은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로

독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기,

치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된

탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의

알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환

또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된

탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지

30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의

알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는

비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6

내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의

알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환

또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된

탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느하나이며;

상기 연결기 L_{13} 은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

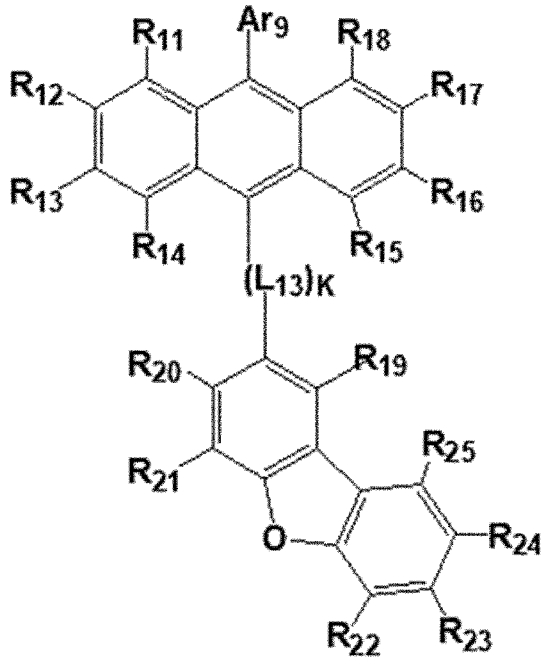
상기 k 는 1 내지 3의 정수이되, 상기 k 가 2 이상인 경우에 각각의 L_{13} 은 서로 동일하거나 상이하다.

[청구항 17]

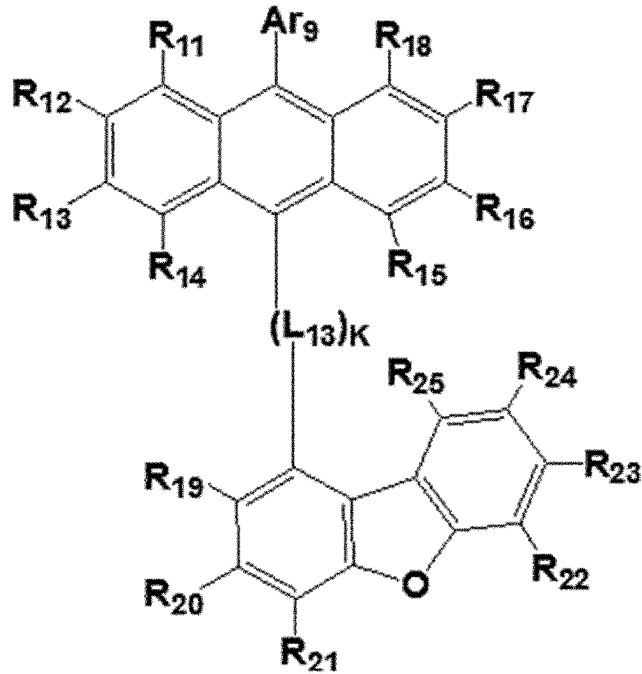
제 16 항에 있어서,

상기 [화학식 H]로 표시되는 안트라센 유도체는 하기 [화학식 H1] 또는 [화학식 H2]로 표시되는 안트라센 유도체인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

[화학식 H1]



[화학식 H2]

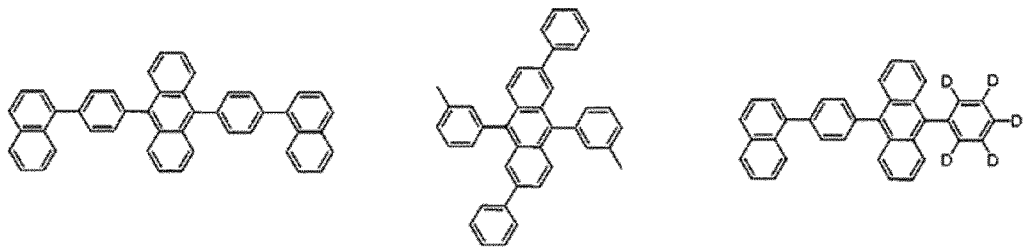


상기 [화학식 H1] 및 [화학식 H2]에서,
상기 치환기 R₁₉ 내지 R₂₅는 동일하거나 상이하며, 각각 상기 제1항에서의 R₁ 내지 R₁₀에서 정의된 바와 동일하다.

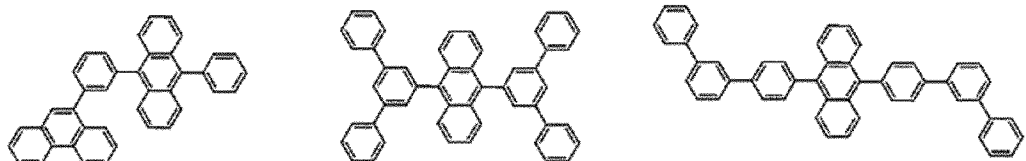
[청구항 18] 제 16 항에 있어서,
상기 연결기 L₁₃이 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.
여기서, 상기 k는 1 내지 2의 정수이되, 상기 k가 2 이상인 경우에 각각의 L₁₃은 서로 동일하거나 상이하다.

[청구항 19] 제 16 항에 있어서,
상기 안트라센 유도체는 하기 <화합물 101> 내지 <화합물 166> 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 소자.

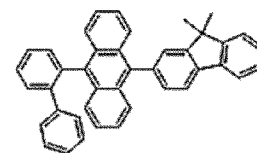
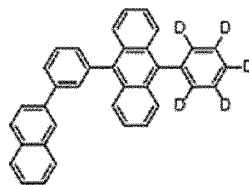
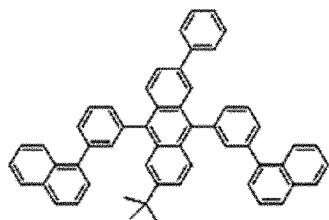
<화합물 101> <화합물 102> <화합물 103>



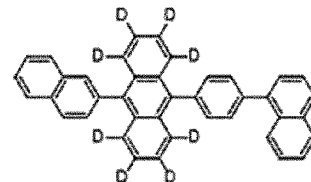
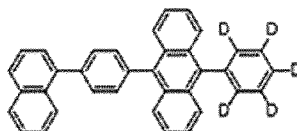
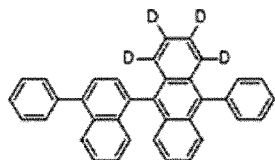
<화합물 104> <화합물 105> <화합물 106>



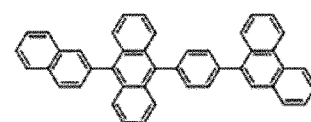
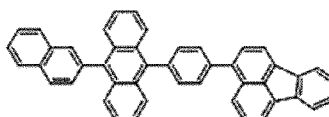
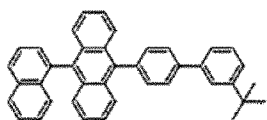
<화합물 107> <화합물 108> <화합물 109>



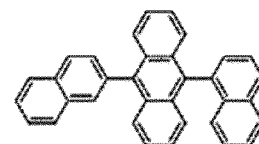
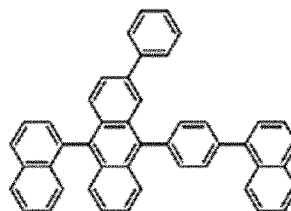
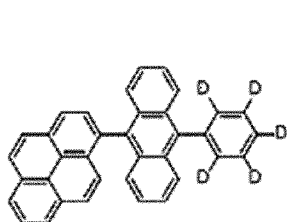
<화합물 110> <화합물 111> <화합물 112>



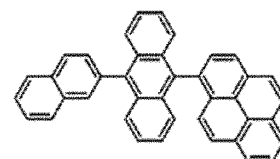
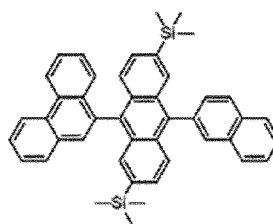
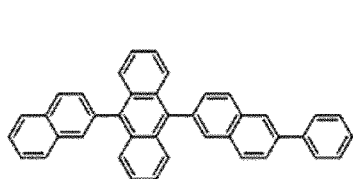
<화합물 113> <화합물 114> <화합물 115>



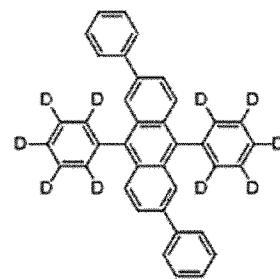
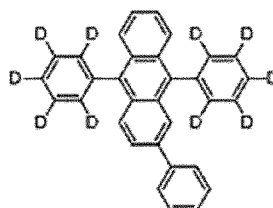
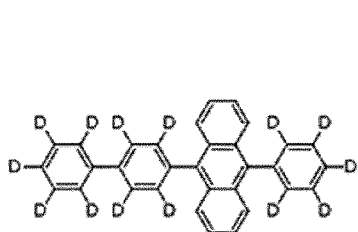
<화합물 116> <화합물 117> <화합물 118>



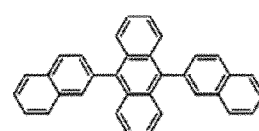
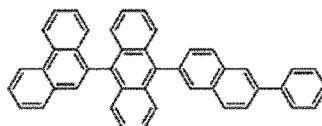
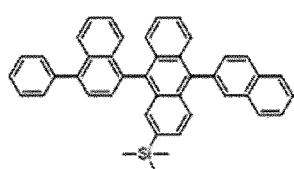
<화합물 119> <화합물 120> <화합물 121>



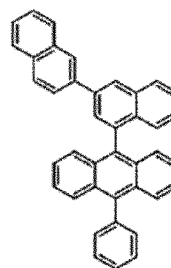
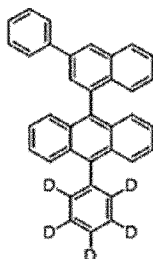
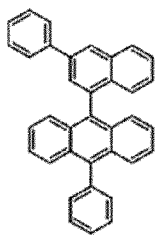
<화합물 122> <화합물 123> <화합물 124>



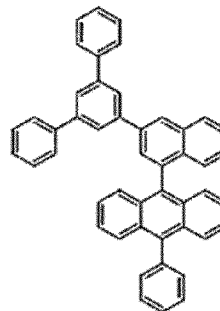
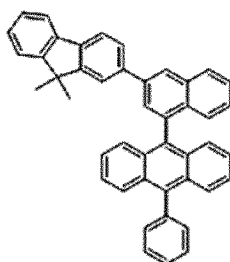
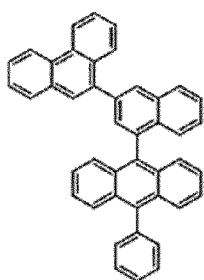
<화합물 125> <화합물 126> <화합물 127>



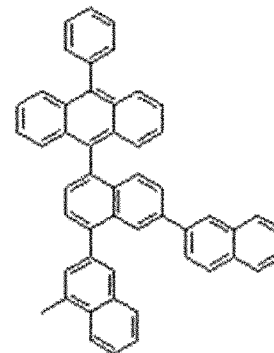
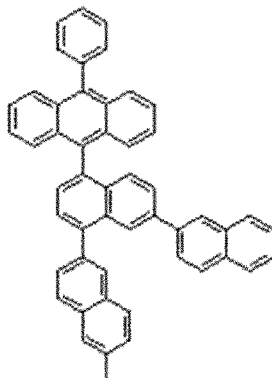
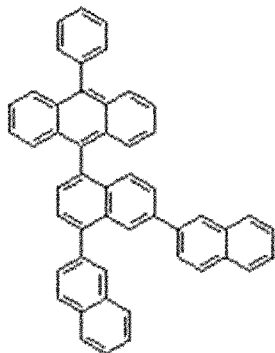
<화합물 128> <화합물 129> <화합물 130>



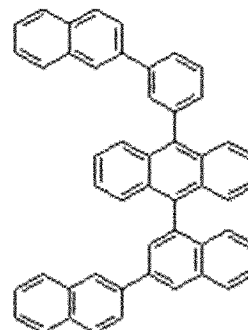
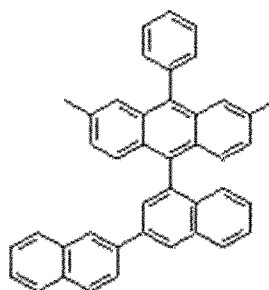
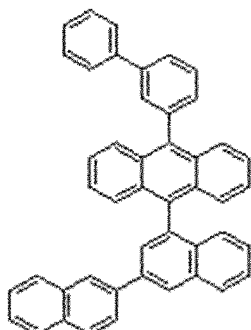
<화합물 131> <화합물 132> <화합물 133>



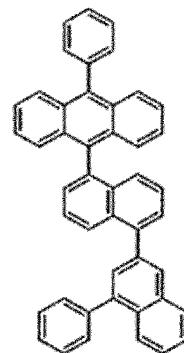
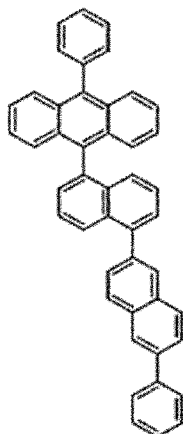
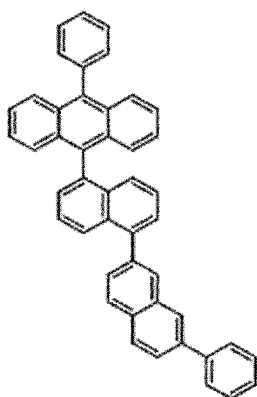
<화합물 134> <화합물 135> <화합물 136>



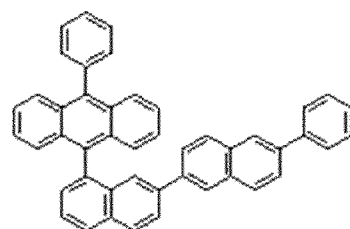
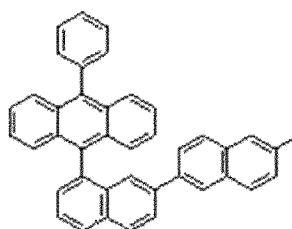
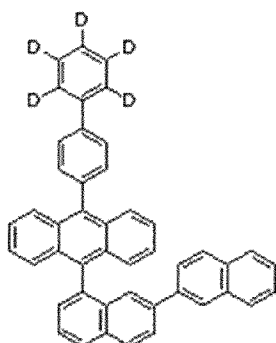
<화합물 137> <화합물 138> <화합물 139>



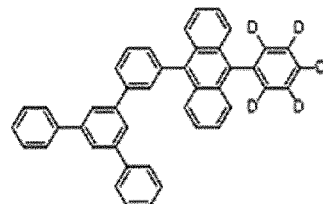
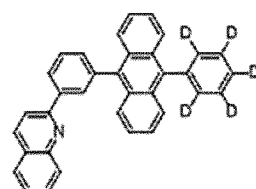
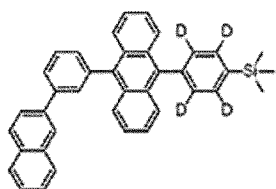
<화합물 140> <화합물 141> <화합물 142>



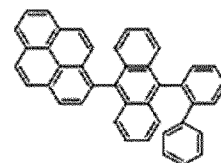
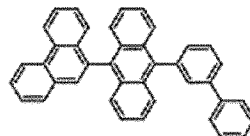
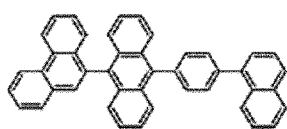
<화합물 143> <화합물 144> <화합물 145>



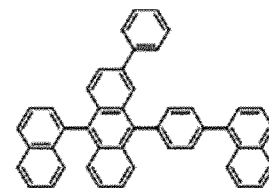
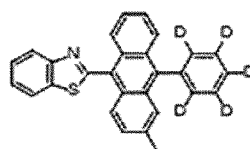
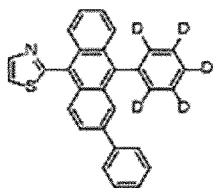
<화합물 146> <화합물 147> <화합물 148>



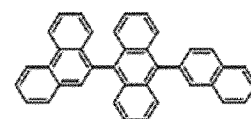
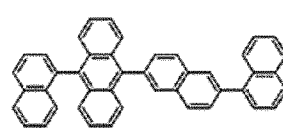
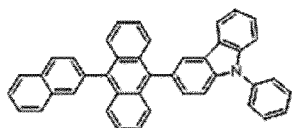
<화합물 149> <화합물 150> <화합물 151>



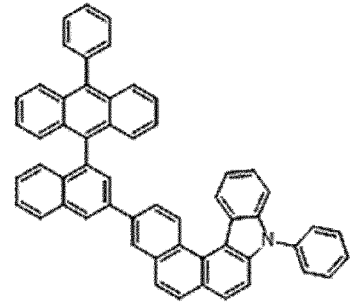
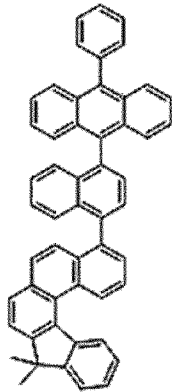
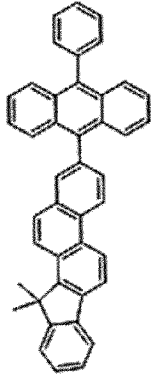
<화합물 152> <화합물 153> <화합물 154>



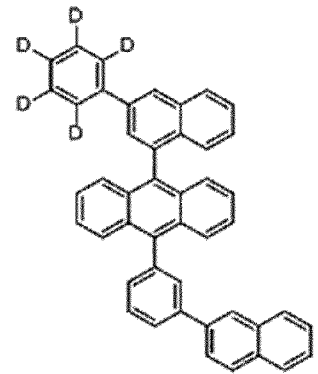
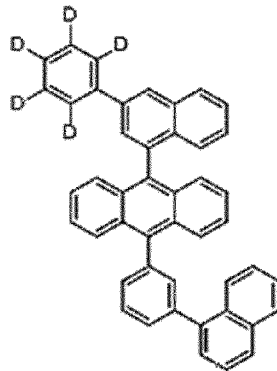
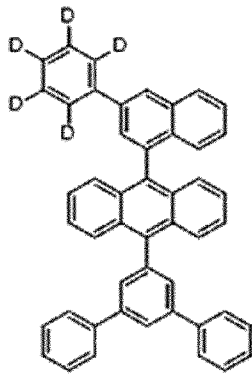
<화합물 155> <화합물 156> <화합물 157>



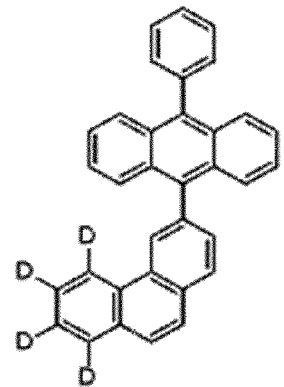
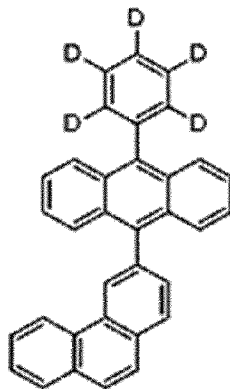
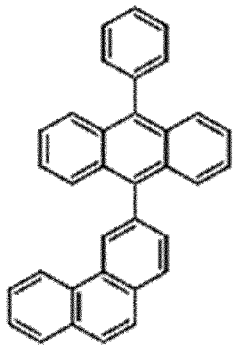
<화합물 158> <화합물 159> <화합물 160>



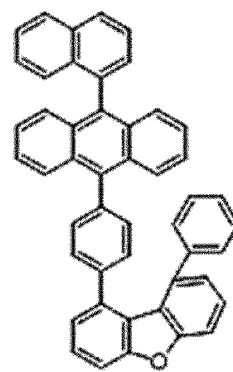
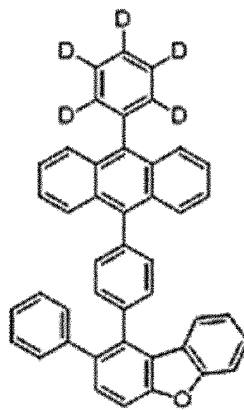
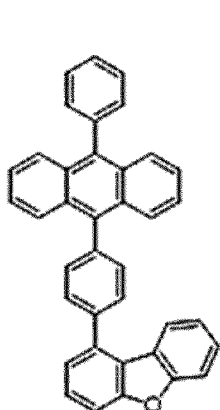
<화합물 161> <화합물 162> <화합물 163>



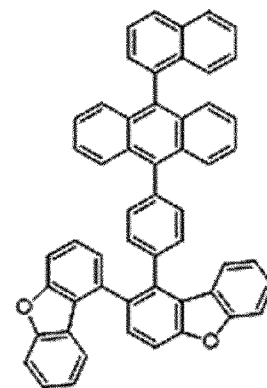
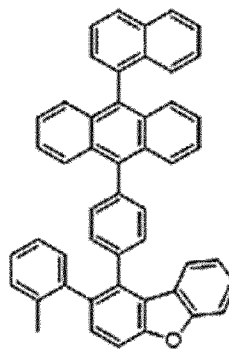
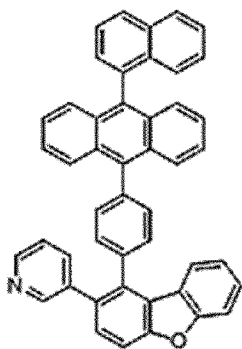
<화합물 164> <화합물 165> <화합물 166>



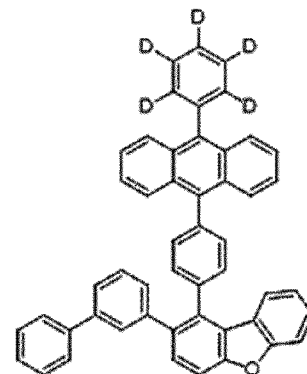
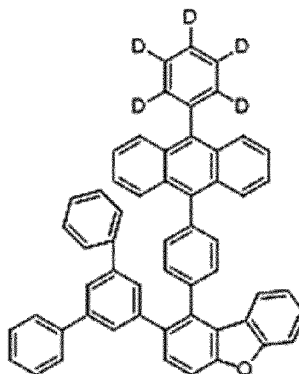
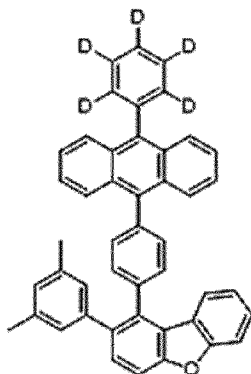
[청구항 20] 제 17 항에 있어서,
 상기 안트라센 유도체는 하기 <화합물 201> 내지 <화합물 281> 중에서
 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 소자.
 <화합물 201><화합물 202><화합물 203>



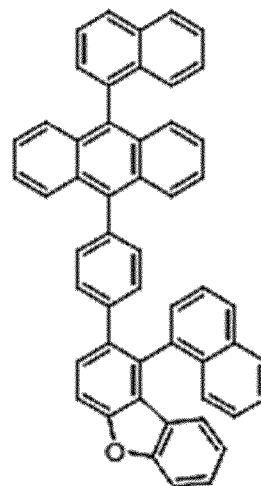
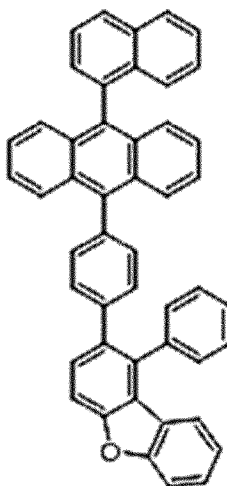
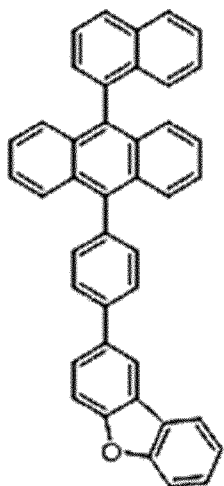
<화합물 204><화합물 205><화합물 206>



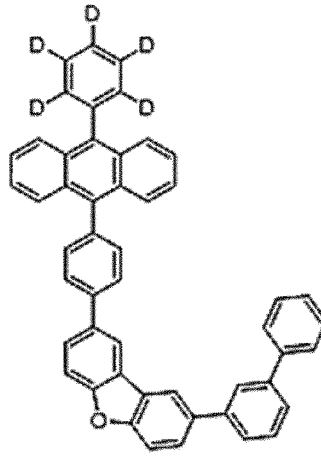
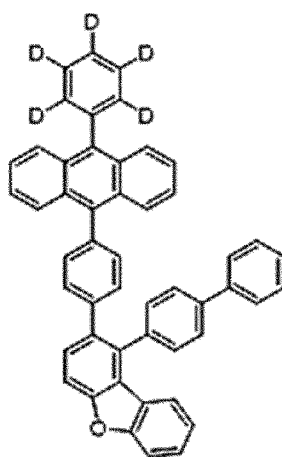
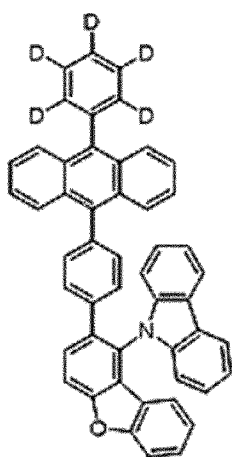
<화합물 207><화합물 208><화합물 209>



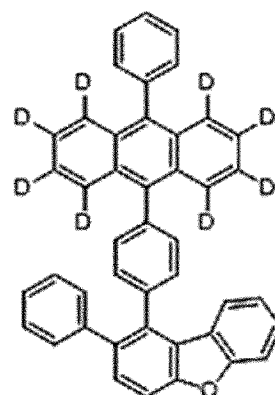
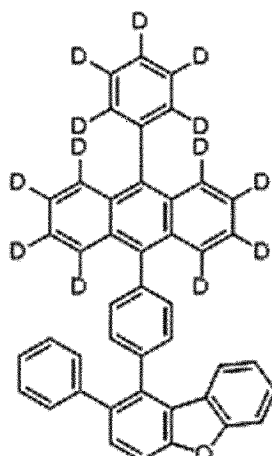
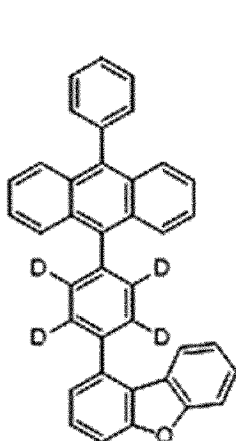
<화합물 210><화합물 211><화합물 212>



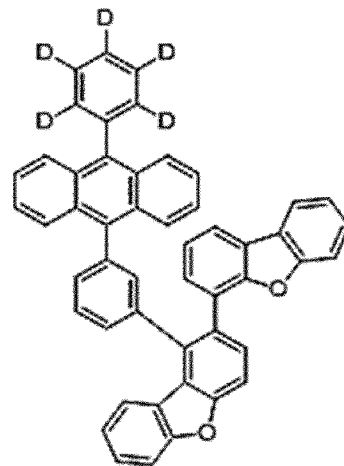
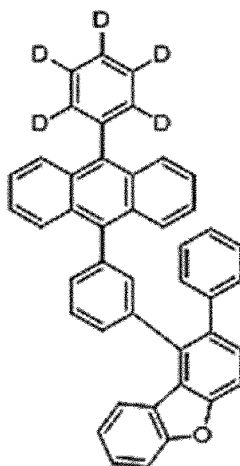
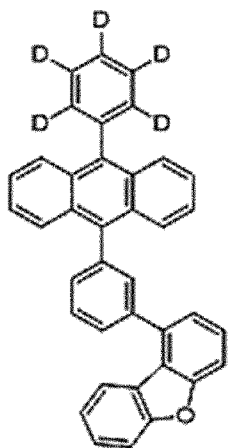
<화합물 213><화합물 214><화합물 215>



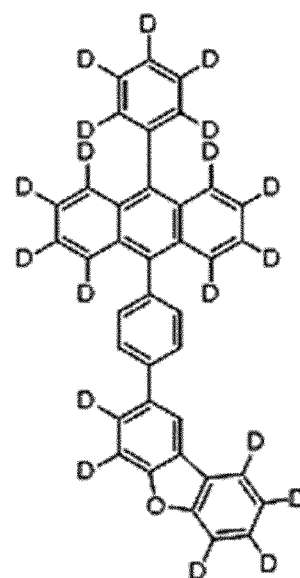
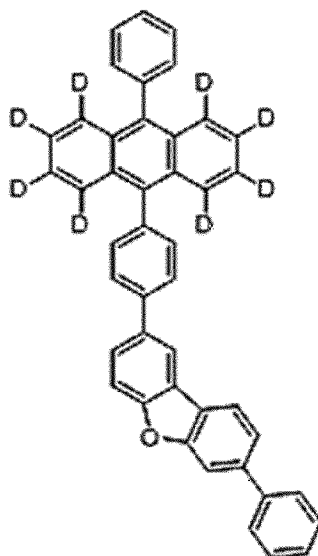
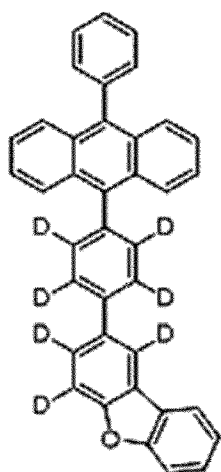
<화합물 216><화합물 217><화합물 218>



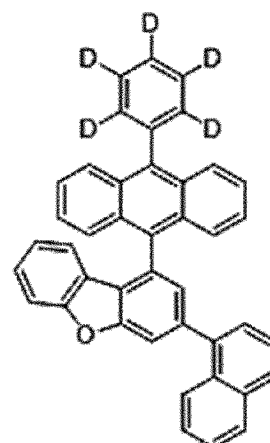
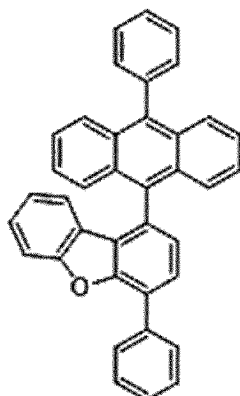
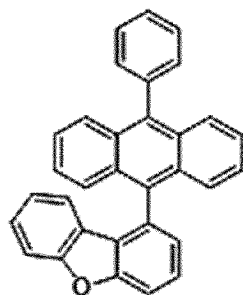
<화합물 219><화합물 220><화합물 221>



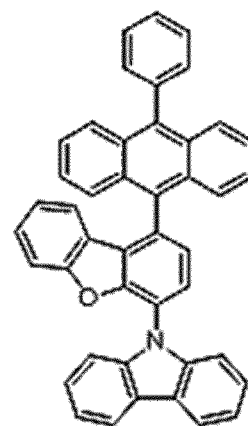
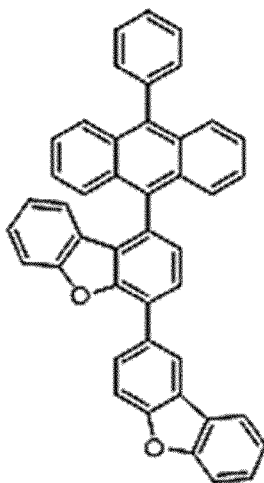
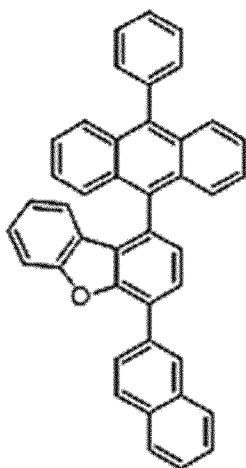
<화합물 222><화합물 223><화합물 224>



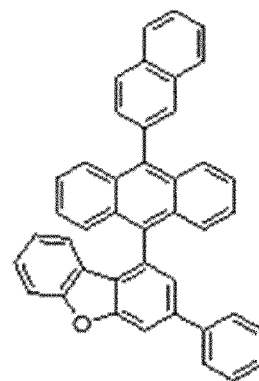
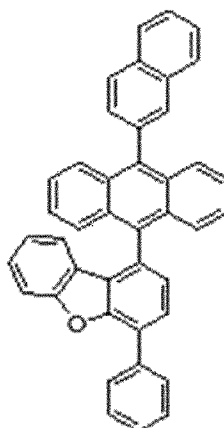
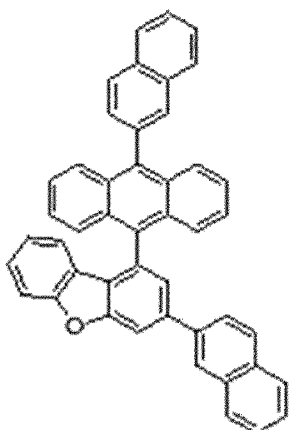
<화합물 225><화합물 226><화합물 227>



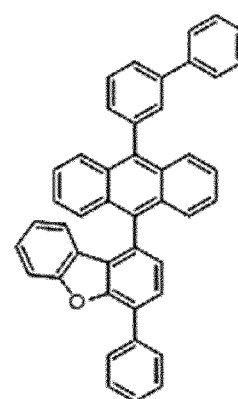
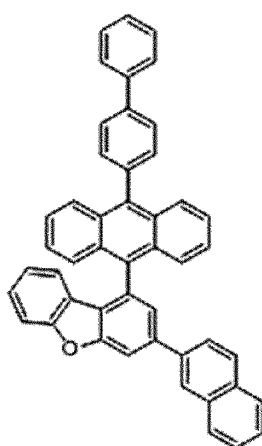
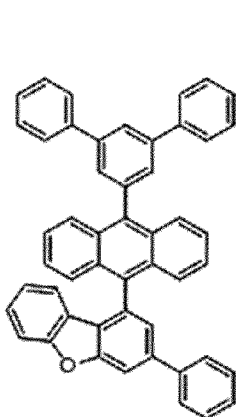
<화합물 228><화합물 229><화합물 230>



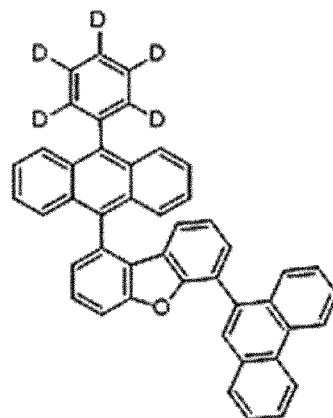
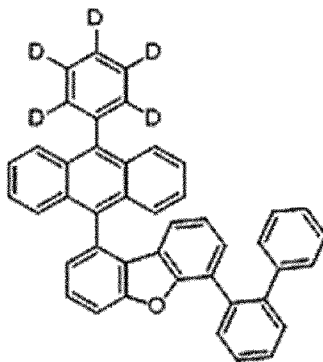
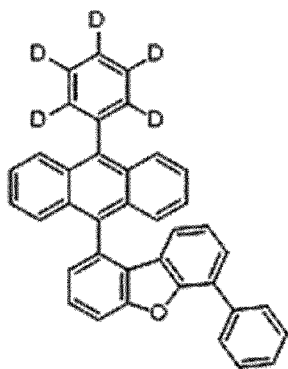
<화합물 231><화합물 232><화합물 233>



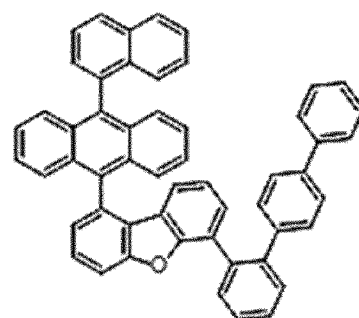
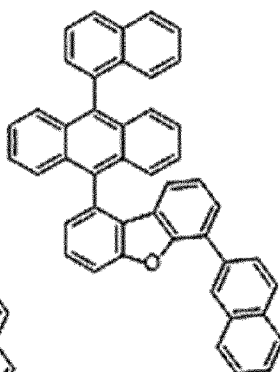
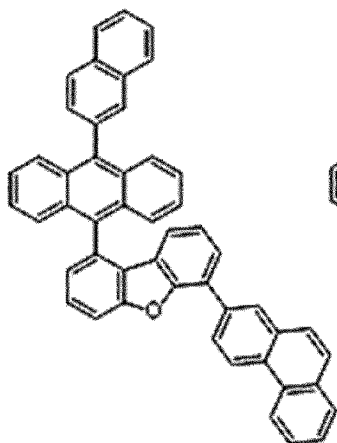
<화합물 234><화합물 235><화합물 236>



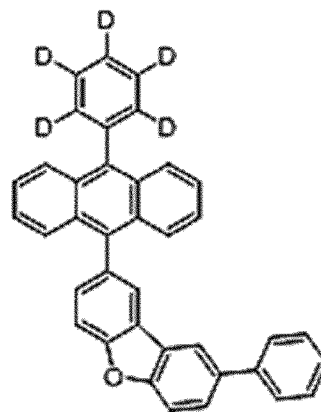
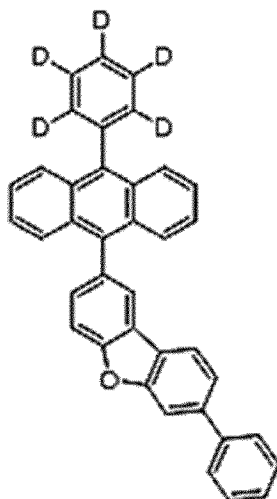
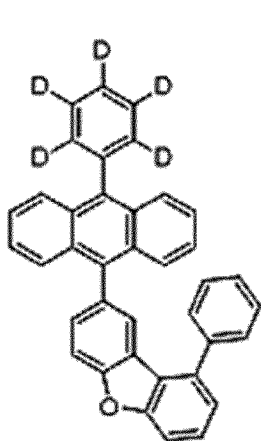
<화합물 237><화합물 238><화합물 239>



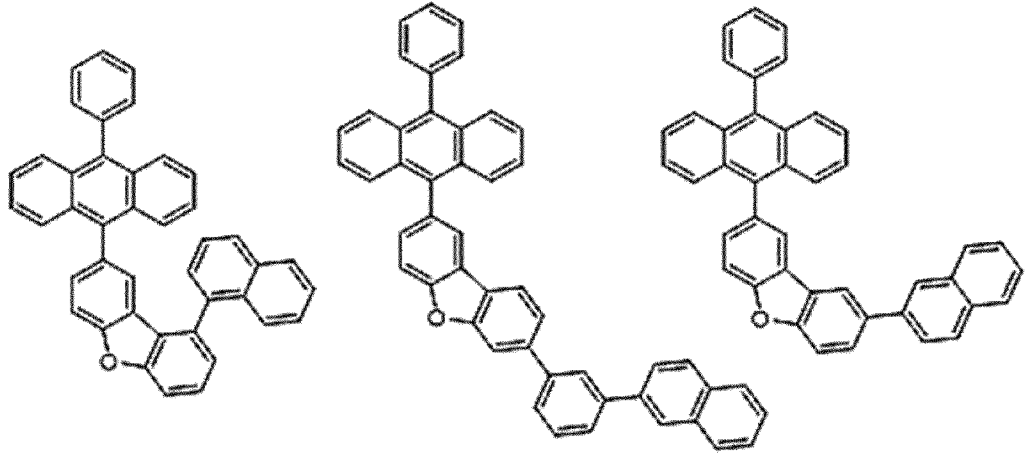
<화합물 240><화합물 241><화합물 242>



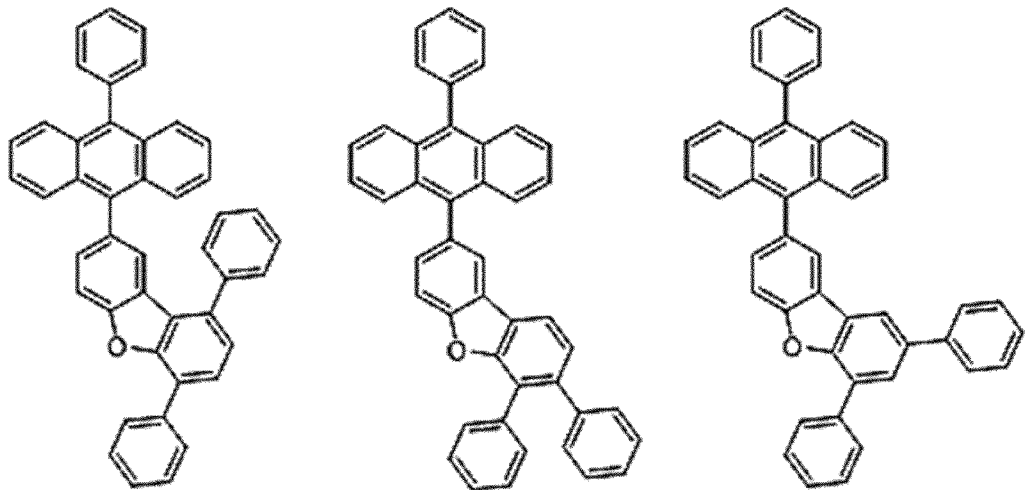
<화합물 243><화합물 244><화합물 245>



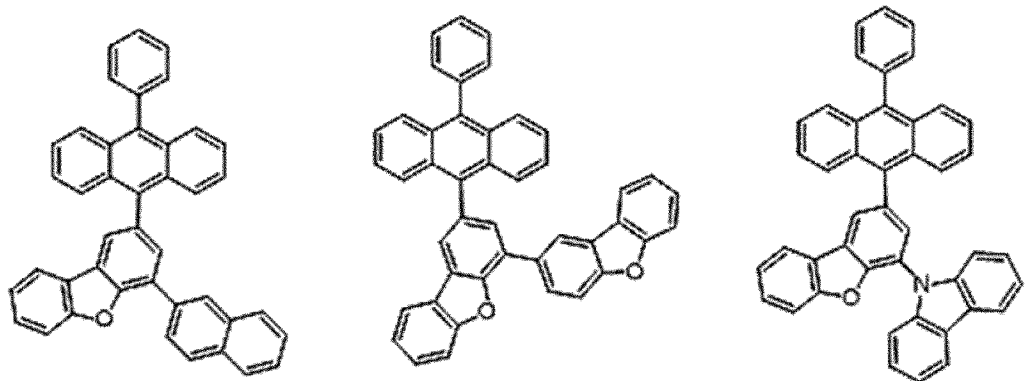
<화합물 246><화합물 247><화합물 248>



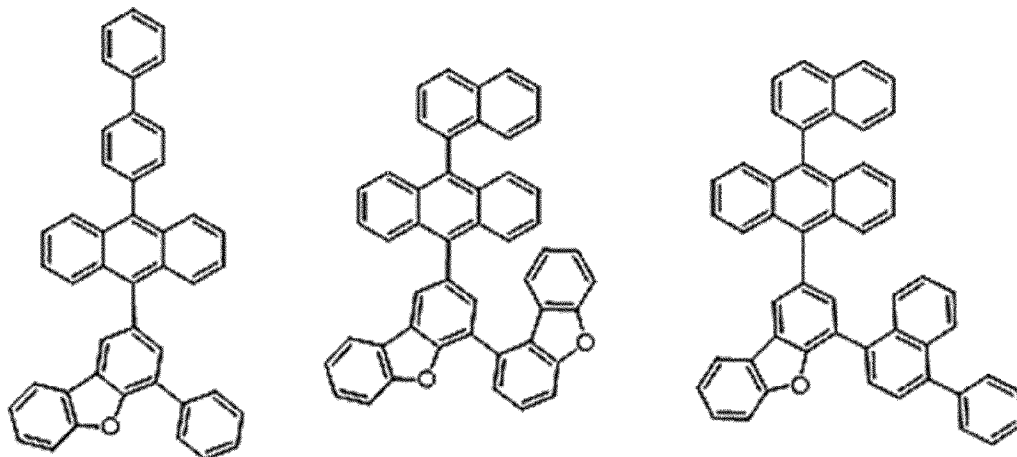
<화합물 249><화합물 250><화합물 251>



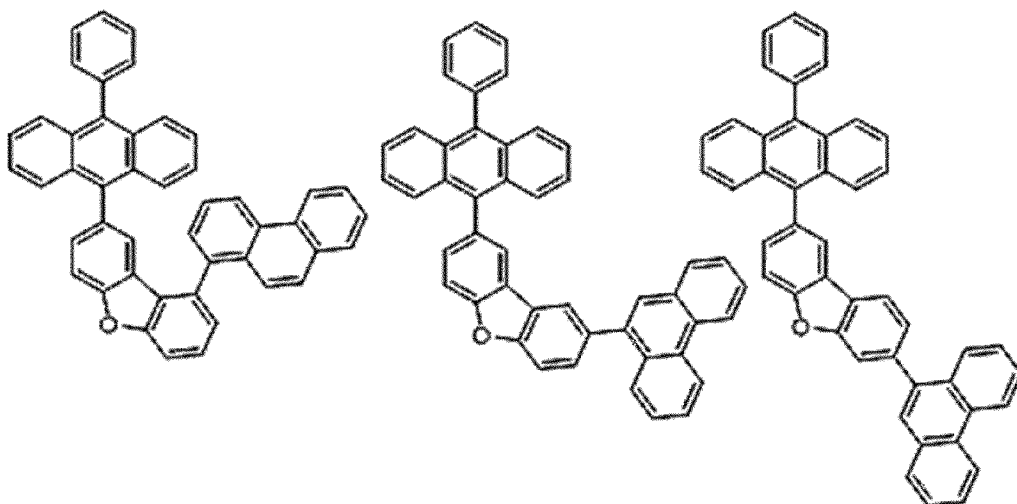
<화합물 252><화합물 253><화합물 254>



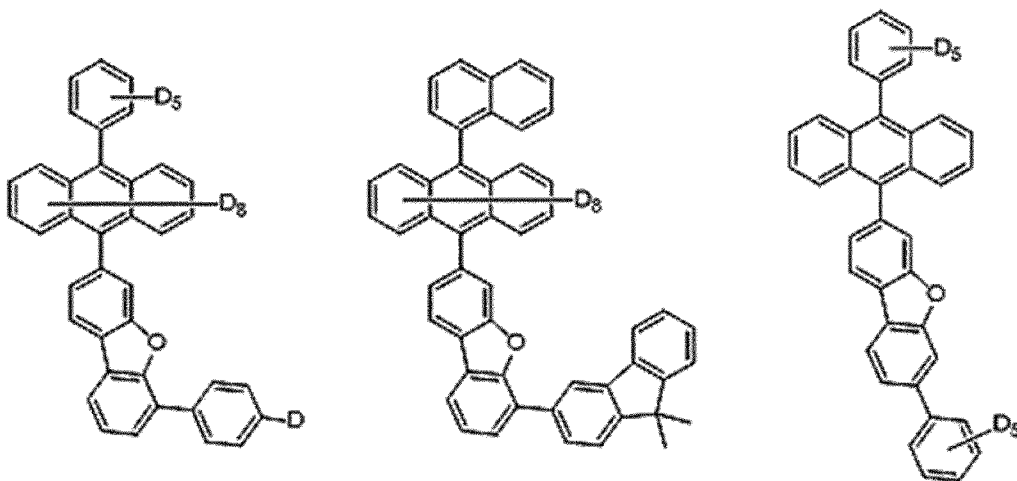
<화합물 255><화합물 256><화합물 257>



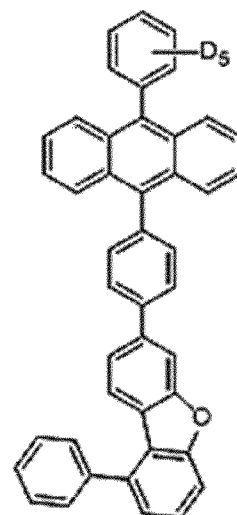
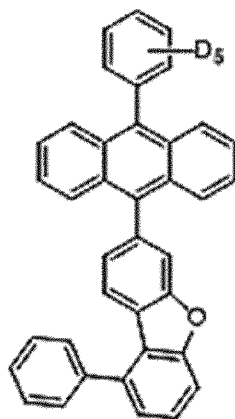
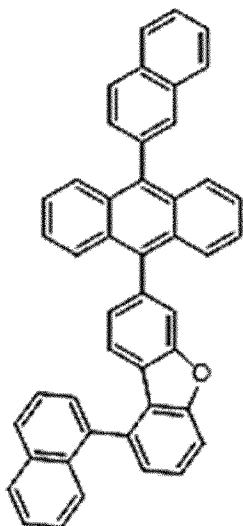
<화합물 258><화합물 259><화합물 260>



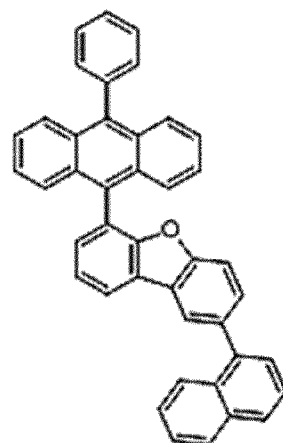
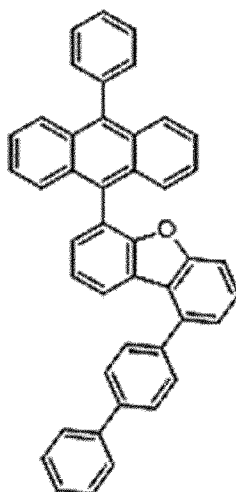
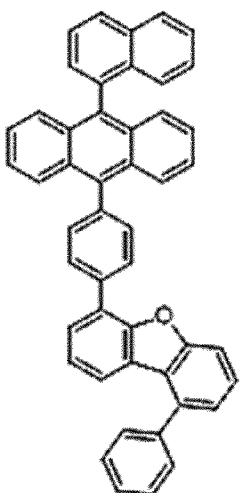
<화합물 261><화합물 262><화합물 263>



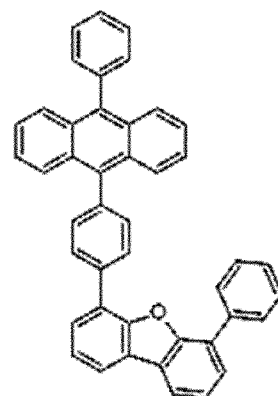
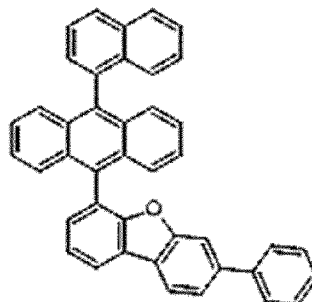
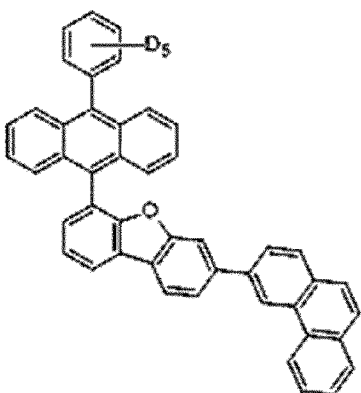
<화합물 264><화합물 265><화합물 266>



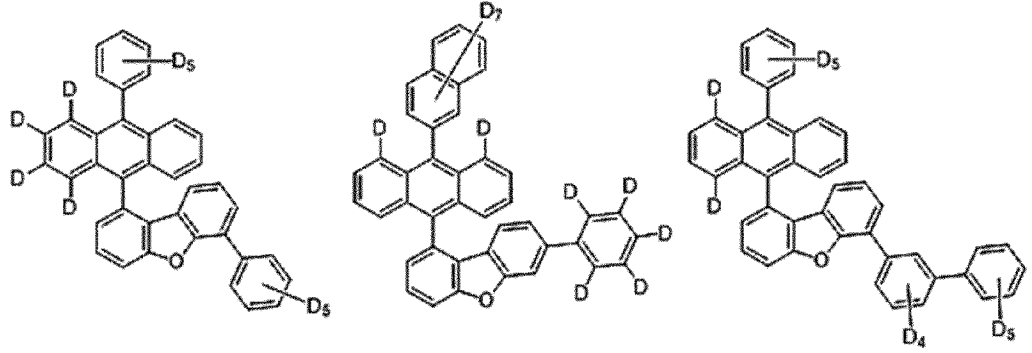
<화합물 267><화합물 268><화합물 269>



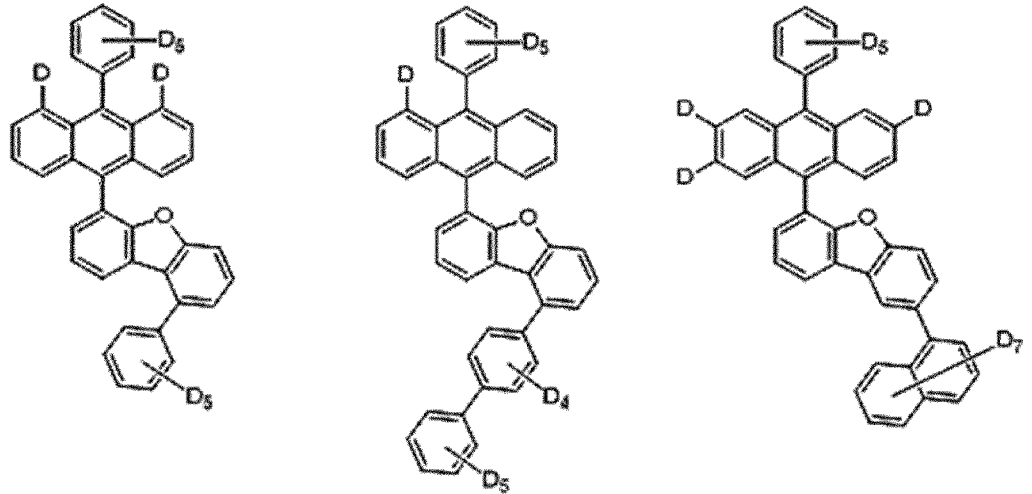
<화합물 270><화합물 271><화합물 272>



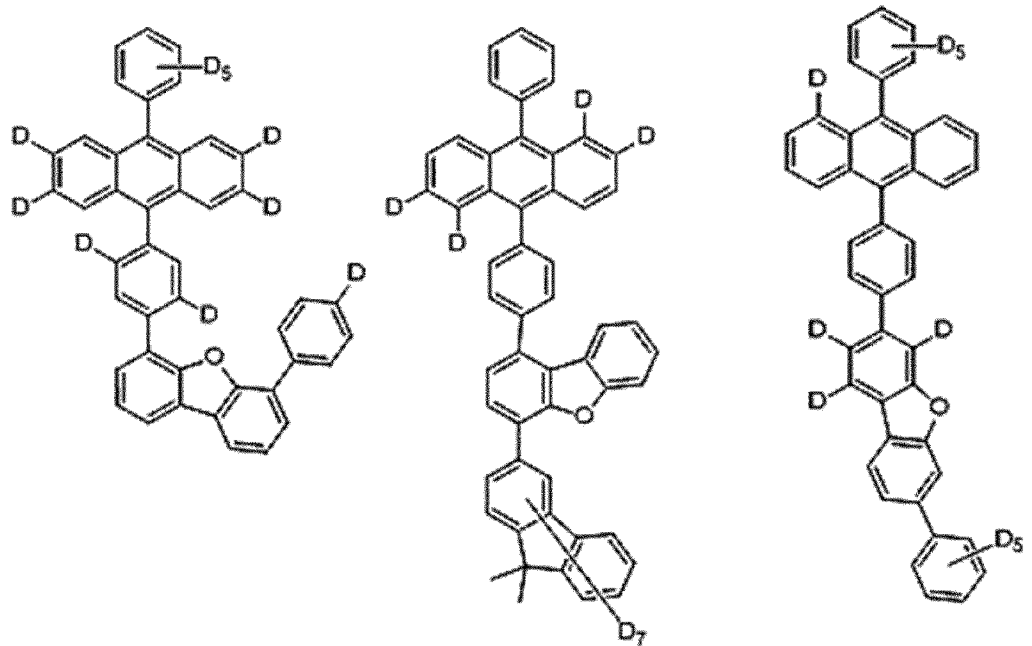
<화합물 273><화합물 274><화합물 275>



<화합물 276><화합물 277><화합물 278>



<화합물 279><화합물 280><화합물 281>



[청구항 21] 제14항에 있어서,
 상기 각각의 층층에서 선택된 하나 이상의 층은 증착공정 또는
 용액공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 22] 제13항에 있어서,
상기 유기발광소자는 평판 디스플레이 장치; 플렉시블 디스플레이 장치;
단색 또는 백색의 평판 조명용 장치; 및, 단색 또는 백색의 플렉시블
조명용 장치;에서 선택되는 어느 하나에 사용되는 것을 특징으로 하는
유기 발광 소자.

[도1]

80
70
60
50
40
30
20
10

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2020/009383

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
C07F 5/02(2006.01)i; H01L 51/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i; H01L 51/56(2006.01)i		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F 5/02; C09K 11/06; H01L 27/32; H01L 51/00; H01L 51/50; H01L 51/56		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models: IPC as above Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, CAplus), Google & keywords: 보론 (B, boron), 인(P, phosphorus), 유기 발광 소자 (organic light emitting device), 발광층(light emitting layer), 도판트(dopant)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2018-0108559 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 04 October 2018. See claims 1, 9 and 15.	1-22
A	KR 10-2019-0042791 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 25 April 2019. See claims 1 and 10.	1-22
A	KR 10-1990818 B1 (MATERIAL SCIENCE CO., LTD.) 19 June 2019. See claims 1 and 5.	1-22
A	KR 10-2018-0134850 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 19 December 2018. See claims 1 and 5.	1-22
A	CN 108409761 A (AAC TECH NANJING INC.) 17 August 2018. See entire document.	1-22
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 26 October 2020		Date of mailing of the international search report 27 October 2020
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon, Republic of Korea 35208		Authorized officer
Facsimile No. +82-42-481-8578		Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2020/009383

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
KR 10-2018-0108559	A		04 October 2018	CN	108473511	A	31 August 2018
				JP	6611825	B2	27 November 2019
				US	2019-0027694	A1	24 January 2019
				WO	2017-126443	A1	27 July 2017

KR 10-2019-0042791	A		25 April 2019	CN	109671852	A	23 April 2019
				US	2019-0115538	A1	18 April 2019

KR 10-1990818	B1		19 June 2019	CN	110444693	A	12 November 2019
				JP	2019-195060	A	07 November 2019

KR 10-2018-0134850	A		19 December 2018	CN	109155368	A	04 January 2019
				US	2019-0207112	A1	04 July 2019
				WO	2017-188111	A1	02 November 2017

CN	108409761	A	17 August 2018	None			

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07F 5/02(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/56(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07F 5/02; C09K 11/06; H01L 27/32; H01L 51/00; H01L 51/50; H01L 51/56

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, CAplus), Google & 키워드: 보론 (B, boron), 인(P, phosphorus), 유기 발광 소자 (organic light emitting device), 발광층(light emitting layer), 도판트(dopant)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	KR 10-2018-0108559 A (가코우 호징 관세이 가쿠잉 등) 2018.10.04 청구항 1, 9, 15	1-22
A	KR 10-2019-0042791 A (삼성디스플레이 주식회사) 2019.04.25 청구항 1, 10	1-22
A	KR 10-1990818 B1 (머티어리얼사이언스 주식회사) 2019.06.19 청구항 1, 5	1-22
A	KR 10-2018-0134850 A (가코우 호징 관세이 가쿠잉 등) 2018.12.19 청구항 1, 5	1-22
A	CN 108409761 A (AAC TECH NANJING INC.) 2018.08.17 전문	1-22

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌
 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌
 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후 “X”에 공개된 선출원 또는 특허 문헌
 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일 2020년 10월 26일 (26.10.2020)	국제조사보고서 발송일 2020년 10월 27일 (27.10.2020)
--	---

ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 권용경 전화번호 +82-42-481-3371
---	------------------------------------

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2018-0108559 A	2018/10/04	CN 108473511 A JP 6611825 B2 US 2019-0027694 A1 WO 2017-126443 A1	2018/08/31 2019/11/27 2019/01/24 2017/07/27
KR 10-2019-0042791 A	2019/04/25	CN 109671852 A US 2019-0115538 A1	2019/04/23 2019/04/18
KR 10-1990818 B1	2019/06/19	CN 110444693 A JP 2019-195060 A	2019/11/12 2019/11/07
KR 10-2018-0134850 A	2018/12/19	CN 109155368 A US 2019-0207112 A1 WO 2017-188111 A1	2019/01/04 2019/07/04 2017/11/02
CN 108409761 A	2018/08/17	없음	